

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

DIEGO MANOEL PANONCELI

UM ESTUDO DE BUSCAS UNIDIRECIONAIS
APLICADAS AO MÉTODO BFGS

CURITIBA

2015

DIEGO MANOEL PANONCELI

UM ESTUDO DE BUSCAS UNIDIRECIONAIS
APLICADAS AO MÉTODO BFGS

Dissertação apresentada como requisito parcial à
obtenção do grau de Mestre em Matemática, no
Curso de Pós-Graduação em Matemática, Setor de
Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná.
Orientador: Prof. Dr. Lucas Garcia Pedroso.
Coorientador: Prof. Dr. Rodolfo Gotardi Begiato.

CURITIBA

2015

P195e

Panonceli, Diego Manoel

Um estudo de buscas unidirecionais aplicadas ao método BFGS/ Diego
Manoel Panonceli. – Curitiba, 2015.
117 f. : il. color. ; 30 cm.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas,
Programa de Pós-graduação em Matemática, 2015.

Orientador: Lucas Garcia Pedroso – Co-orientador: Rodolfo Gotardi
Begiato.

Bibliografia: p. 115-117.

1. Otimização matemática. 2. Programação linear. 3. Algoritmos. I.
Universidade Federal do Paraná. II. Pedroso, Lucas Garcia. III. Begiato,
Rodolfo Gotardi. IV. Título.

CDD: 519.6

TERMO DE APROVAÇÃO


**“UM ESTUDO DE BUSCAS UNIDIRECIONAIS APLICADAS AO MÉTODO
BFGS”**

por

Diego Manoel Panonceli

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre no Programa de Pós-Graduação em Matemática,
pela Comissão Examinadora composta por:

Orientador:



Prof. Dr. Lucas Garcia Pedroso
Dep. de Matemática – UFPR



Prof. Dra. Maria Aparecida Diniz Ehrhardt
UNICAMP



Prof. Dra. Elizabeth Wegner Karas
Dep. de Matemática – UFPR

Curitiba, 27 de fevereiro de 2015.



Ministério da Educação
Universidade Federal do Paraná
Setor de Ciências Exatas/Departamento de Matemática
Programa de Pós-Graduação em Matemática - PPGM

ATA DA 65ª DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Aos vinte e sete dias do mês de fevereiro de 2015, na sala de Reuniões do Setor de Ciências Exatas, foi instalada pelo Professor Lucas Garcia Pedroso, a Banca Examinadora para a sexagésima quinta Defesa de Dissertação de Mestrado em Matemática. Estiveram presentes ao Ato, professores, alunos e visitantes.

A banca examinadora, homologada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, ficou constituída pelos professores: Profa. Dra. Maria Aparecida Diniz Ehrhardt, da Universidade Estadual de Campinas, Profa. Dra. Elizabeth Wegner Karas, do Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Paraná, e o Prof. Dr. Lucas Garcia Pedroso, orientador da dissertação, a quem coube a presidência dos trabalhos.

Às nove horas, a banca iniciou seus trabalhos, convidando o candidato **DIEGO MANOEL PANONCELI** a fazer a apresentação do tema da dissertação intitulada "UM ESTUDO DE BUSCAS UNIDIRECIONAIS APLICADAS AO MÉTODO BFGS". Encerrada a apresentação, iniciou-se a fase de arguição pelos membros participantes. Após a arguição, a banca com pelo menos 03 (três) membros, reuniu-se para apreciação do desempenho do pós-graduando.

A banca considerou que o pós-graduando fez uma apresentação com a necessária concisão. A Dissertação apresenta contribuição à área de estudos e não foram registrados problemas fundamentais de estrutura e redação, resultando em plena e satisfatória compreensão dos objetivos pretendidos.

Tendo em vista a dissertação e a arguição, os membros presentes da banca decidiram pela sua aprovação.

Curitiba, 27 de fevereiro de 2015.

Prof. Dr. Lucas Garcia Pedroso
Presidente

Profa. Dra. Maria Aparecida Diniz Ehrhardt
Titular

Profa. Dra. Elizabeth Wegner Karas
Titular

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
Diego Manoel Panonceli

**“UM ESTUDO DE BUSCAS UNIDIRECIONAIS APLICADAS AO MÉTODO
BFGS”**



Prof. Dr. Lucas Garcia Pedroso
Orientador - Dep. de Matemática – UFPR



Prof. Dr. Rodolfo Gotardi Begiato
Coorientador - Dep. de Matemática – UTFPR



Profa. Dra. Maria Aparecida Diniz Ehrhardt
Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP



Profa. Dra. Elizabeth Wegner Karas
Dep. de Matemática – UFPR

Curitiba, 27 de fevereiro de 2015.

*Dedico este trabalho aos meus pais
Darci e Maria.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Darci e Maria, que sempre foram fundamentais em todos os processos na minha formação.

Aos meu orientadores, Lucas e Rodolfo, por estarem sempre dispostos a ajudar no desenvolvimento teórico-prático deste trabalho.

Aos professores do PPGM, em especial à professora Elizabeth Wegner Karas, que com discussões proveitosas auxiliou em diversos pontos da pesquisa.

Aos membros da banca, por aceitarem o convite e fazerem sugestões enriquecedoras. Aos meus orientadores de iniciação científica, Luis Antônio Romero Grados e Guiliano La Guardia, e ao professor Marciano Pereira, que me incentivaram e apoiaram para fazer pós graduação em matemática.

Ao Programa de Pós Graduação em Matemática da UFPR pelas excelentes condições e qualidade de estudo.

À CAPES, pelo suporte financeiro.

Agradeço a todos os amigos, que me incentivaram e ajudaram de alguma forma no desenvolvimento deste trabalho.

E finalmente, agradeço à minha namorada, Juliana Almeida Maia.

“O mundo pertence aos otimistas: os pessimistas são meros espectadores.”

Dwight D. Eisenhower

RESUMO

Os processos iterativos existentes para a resolução do problema de minimizar uma função contínua muitas vezes realizam buscas unidirecionais. As buscas unidirecionais são importantes para garantir a convergência global de métodos de Otimização. Neste trabalho, analisamos algumas buscas unidirecionais propostas na literatura e seus resultados teóricos. Damos maior ênfase às buscas monótonas clássicas de Armijo, de Wolfe e de Goldstein, além das não monótonas de Grippo, Lampariello e Lucidi, de Dai e de Zhang e Hager. As buscas unidirecionais não monótonas, ao contrário das monótonas, permitem vários acréscimos consecutivos na função objetivo. As buscas unidirecionais monótonas de Zhang, Zhou e Li e de Shi e Shen e as buscas não monótonas de Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan, de Cheng e Li, de Yin e Du e de Shi e Shen são propostas que também foram abordadas no texto. Todas as buscas estudadas neste trabalho foram comparadas em seu desempenho através de suas utilizações no algoritmo BFGS de Otimização irrestrita. Cada busca foi testada em várias versões, mediante ampla variação dos parâmetros que a definem. Analisamos os resultados numéricos referentes à robustez e à eficiência em termos de trabalho na resolução de problemas clássicos da literatura.

Palavras Chaves: Otimização irrestrita, buscas unidirecionais monótonas, buscas unidirecionais não monótonas, método BFGS.

ABSTRACT

The iterative processes for solving the problem of minimizing a continuous function are commonly based on line searches. Line searches are important for ensuring global convergence of optimization methods. In this work, we analyze some line searches and their theoretical results. We focus mainly on the classical monotone searches of Armijo, Wolfe and Goldstein, besides the nonmonotone proposals of Grippo, Lampariello and Lucidi, Dai and Zhang and Hager. The monotone line searches of Zhang, Zhou and Lie, Shi and Shen and the nonmonotone searches of Diniz-Ehrhardt, Martínez and Raydan, Cheng and Lie, Yin and Du and Shi and Shen are also approached in the text. All the searches studied in this work were compared in terms of performance when applied to BFGS algorithm for unconstrained optimization. Each search was tested in several versions, varying widely the parameters which define it. We analyzed the numerical results concerning the robustness and efficiency in solving classical problems from the literature.

Key-Words: Unconstrained optimization, monotone line searches, nonmonotone line searches, BFGS method.

Lista de Figuras

3.1	Conjunto admissível para o critério de decréscimo simples.	31
3.2	Conjunto admissível para o critério de Armijo.	33
3.3	Passos que satisfazem a condição de curvatura.	36
3.4	Conjunto admissível pelo critério de Wolfe.	37
3.5	Passos que satisfazem a condição de curvatura de Wolfe forte.	41
3.6	Conjunto admissível pelas condições de Wolfe forte.	42
3.7	Conjunto admissível pelas condições de Goldstein.	45
4.1	Vales estreitos - Curvas de nível da função Scaled Rosenbrock, $c = 100$	54
4.2	Direção de um método em um vale estreito.	54
4.3	Critérios de buscas monótonas e não monótonas em um vale estreito.	55
4.4	Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi - tipo Armijo.	57
5.1	Perfis de Desempenho - Critérios de buscas monótonas mais robustos.	102
5.2	Perfis de Desempenho - Critérios de buscas não monótonas mais robustos.	102
5.3	Perfis de Desempenho - Critérios mais robustos.	103
5.4	Perfis de Desempenho - Critérios mais eficientes em termos de trabalho.	104
5.5	Perfis de Desempenho - Critérios sem derivadas mais robustos.	104
5.6	Perfis de Desempenho - Critérios sem derivadas mais eficientes em termos de trabalho.	105

Lista de Tabelas

4.1	Método de Newton com passo unitário.	55
5.1	Parâmetros por critério.	96
5.2	Melhores resultados em termos de robustez.	99
5.3	Resultado de eficiência em termos de trabalho.	101
5.4	Trabalho dos algoritmos por problema.	106
5.5	Eficiência em termos de trabalho.	106
5.6	Desempenho.	106
5.7	Desempenho por critério.	107
A.1	Parâmetros utilizados em cada busca.	110
A.2	Resultados obtidos em cada combinação de critério e parâmetros.	112

LISTA DE ABREVIATURAS

As abreviaturas utilizadas nesta dissertação são:

Arm	Critério de Armijo
BFGS	Método de Broyden, Fletcher, Goldfard e Shanno
CL	Critério de Cheng e Li
DaiAr	Critério de Dai (Armijo)
DaiW	Critério de Dai (Wolfe Forte)
DaiG	Critério de Dai (Goldstein)
DecS	Critério de Decréscimo Simples
DMR	Critério de Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan
GLLAr	Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi (Armijo)
GLLW	Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi (Wolfe Forte)
GLLG	Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi (Goldstein)
Gold	Critério de Goldstein
NMSS	Critério de busca não monótona de Shi e Shen
Puro	Critério sem busca unidirecional
SS	Critério de Shi e Shen
Wolf	Critério de Wolfe
WolfF	Critério de Wolfe Forte
YD	Critério de Yin e Du
ZHAr	Critério de Zhang e Hager (Armijo)
ZHW	Critério de Zhang e Hager (Wolfe Forte)
ZHG	Critério de Zhang e Hager (Golsdein)
ZZL	Critério de Zhang, Zhou e Li

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO DE CONCEITOS	4
2.1	Topologia do \mathbb{R}^n	4
2.2	Sequências em \mathbb{R}^n	9
2.3	Problema Geral	11
2.4	Algoritmos Básico e BFGS	13
2.5	Velocidade de Convergência	23
2.5.1	Convergência q	23
2.5.2	Convergência r	25
2.6	Convexidade de funções	26
3	BUSCAS UNIDIRECIONAIS MONÓTONAS	29
3.1	Critério Puro	30
3.2	Critério de Decréscimo Simples	30
3.3	Critério de Armijo	32
3.4	Critério de Wolfe	35
3.5	Critério de Wolfe Forte	40
3.6	Critério de Goldstein	44
3.7	Critério de Shi e Shen	47
3.8	Critério de Zhen, Zhou e Li	49
4	BUSCAS UNIDIRECIONAIS NÃO MONÓTONAS	52

4.1	Vales estreitos e curvados	53
4.2	Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi - Tipo Armijo	54
4.3	Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi - Tipo Wolfe	64
4.4	Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi - Tipo Goldstein	65
4.5	Critério de Dai - Tipo Armijo	66
4.6	Critério de Dai - Tipo Wolfe	73
4.7	Critério de Dai - Tipo Goldstein	74
4.8	Critério de Zhang e Hager - Tipo Armijo	77
4.9	Critério de Zhang e Hager - Tipo Wolfe	83
4.10	Critério de Zhang e Hager - Tipo Goldstein	84
4.11	Critério de Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan	84
4.12	Critério de Cheng e Li	87
4.13	Critério de Busca Não Monótona de Shi e Shen	89
4.14	Critério de Yin e Du	90
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	92
5.1	Algoritmo Utilizado	92
5.2	Metodologia de Comparação	93
5.3	Escolha dos Parâmetros	95
5.4	Critérios de Parada e Parâmetros do BFGS	97
5.5	Banco de funções	97
5.6	Resultados numéricos	98
5.6.1	Escolha dos Critérios Robustos	98
5.6.2	Escolha dos Critérios Eficientes	100
5.6.3	Eficiência entre os critérios robustos	101
5.6.4	Robustez entre os critérios mais eficientes	103
5.6.5	Os critérios sem derivadas	104
5.6.6	Proposta de uma nova comparação	105
6	CONCLUSÃO	108
A	RESULTADOS NUMÉRICOS	110

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A Otimização é um campo da Matemática de grande interesse por seu potencial de aplicação a problemas práticos. Neste trabalho, nossa atenção está voltada para os problemas de Otimização Irrestrita, que possuem a forma

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & x \in \mathbb{R}^n \end{array} \quad (1.1)$$

onde a função objetivo $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é continuamente diferenciável. Este problema aparece com frequência, por exemplo, em diversas aplicações relacionadas às Ciências Exatas e Naturais, Engenharia, Medicina, Economia, Administração, Informática e em aplicações industriais diversas. O interesse em estudar métodos de minimização para resolver o problema (1.1) é devido a essa demanda. Uma classe importante de métodos desenvolvidos para a resolução de (1.1) é formada pelos chamados métodos que utilizam buscas unidirecionais. Dado um ponto inicial $x_0 \in \mathbb{R}^n$, esta classe de métodos gera uma sequência iterativa $\{x_k\}$ definida por

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.2)$$

onde $d_k \in \mathbb{R}^n$ é uma direção e $\alpha_k \in \mathbb{R}$ é denominado de comprimento do passo. A direção d_k e o comprimento do passo α_k são obtidos mediante determinadas regras que variam conforme o método. Os métodos de Cauchy, de Newton, BFGS, DFP e do Gradiente Conjugado (veja [30]) são exemplos clássicos de métodos que utilizam buscas unidirecionais.

Fixados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$ e uma direção $d_k \in \mathbb{R}^n$, o processo de encontrarmos um comprimento do passo α_k a partir de x_k e na direção d_k é denominado busca unidirecional. Uma vez que foi dada uma direção e definido um comprimento do passo, os métodos que utilizam busca unidirecional geram uma sequência iterativa $\{x_k\}$ pela relação (1.2). Em geral, bons métodos de Otimização são aqueles que para qualquer sequência gerada pelo método temos que todos os seus valores de aderência são pontos estacionários para a função objetivo do problema (1.1), ou seja, satisfazem condições necessárias de otimalidade de primeira ordem, que serão enunciadas no Capítulo 2. Dizemos que tais métodos têm convergência global. A utilização de buscas uni-

direcionais adequadas é fundamental para garantir a convergência global de vários algoritmos de Otimização. Outras buscas unidirecionais garantem um resultado mais fraco: de qualquer sequência gerada por um método possuir algum valor de aderência que é ponto estacionário da função objetivo do problema (1.1).

A finalidade deste trabalho é fazer um levantamento teórico/prático de algumas buscas unidirecionais presentes na literatura e compará-las mediante experimentos numéricos utilizando a direção obtida pelo Método BFGS.

O Capítulo 2 apresenta definições e resultados teóricos básicos de Análise, de Álgebra Linear e de Otimização que são utilizados durante o trabalho. Discutimos a dedução do método BFGS e suas propriedades importantes para fundamentar os testes computacionais do Capítulo 5. Algumas definições sobre a velocidade de convergência e de convexidade de funções também são abordadas neste capítulo.

O Capítulo 3 apresenta um estudo sobre as buscas unidirecionais monótonas, isto é, buscas unidirecionais que consistem em determinar comprimentos de passo tais que a sequência $\{f(x_k)\}_{k \in \mathbb{N}}$ seja monótona decrescente. Neste capítulo são tratadas as buscas unidirecionais clássicas, Armijo [2], Wolfe [35, 36], Wolfe Forte [35, 36] e Goldstein [19]. A busca unidirecional de Armijo requer uma boa redução de f a partir de x_k na direção d_k . Pode acontecer, muitas vezes, que o comprimento do passo α_k escolhido pela busca de Armijo seja “pequeno” ou esteja longe de um minimizador local da restrição da função objetivo f na direção d_k a partir de x_k . Isto pode interferir no desempenho do algoritmo em questão fazendo com que a sequência gerada progrida lentamente para a solução. As buscas de Wolfe e de Wolfe Forte surgem com o intuito de evitar comprimentos de passo “pequenos” e aproximá-los de um minimizador local da restrição da função objetivo f na direção d_k a partir de x_k , adicionando à busca de Armijo uma condição de curvatura, onde a busca de Wolfe Forte é mais rigorosa que a de busca de Wolfe. No entanto, a condição de curvatura requer avaliações extras do gradiente de f , o que torna o processo de minimização mais caro. A condição de Goldstein visa baratear o processo, eliminando passos curtos, porém sem utilizar avaliações extras de gradiente. Além dessas buscas unidirecionais clássicas, analisamos também as buscas monótonas de Shi e Shen [34] e de Zhen, Zhou e Li [39], que são baseadas nas busca de Armijo. A importância do uso de buscas unidirecionais também é justificada mediante a exposição do decréscimo simples e de métodos sem busca que não possuem resultados de convergência.

O Capítulo 4 é utilizado para discutir as buscas unidirecionais não monótonas que são buscas em que a sequência $\{f(x_k)\}$ não é necessariamente decrescente. Iniciamos com a exposição da busca unidirecional de Grippo, Lampariello e Lucidi [21], precursora das buscas não monótonas e com um estudo do termo “vales estreitos” que motiva o uso desse tipo de busca unidirecional. A proposta de Grippo, Lampariello e Lucidi permite acréscimos controlados nos valores de função utilizando o máximo dos valores de função de algumas iterações anteriores. Além disso, discutimos as propostas de Dai [11], de Zhang e Hager [38], e a não monótona de Shi e Shen [33]. A busca de Dai deixa a proposta de Grippo, Lampariello e Lucidi um pouco mais monótona para tentar aumentar a eficiência. A proposta de Zhang e Hager é motivada

pelo argumento de que as buscas de Grippo, Lampariello e Lucidi e de Dai descartam bons valores de função com a utilização do maior valor de função de algumas iterações antecedentes. Os critérios de Zhang e Hager substituem este valor por uma média ponderada dos valores de função. A busca não monótona de Shi e Shen visa admitir comprimentos de passo maiores que a busca de Grippo, Lampariello e Lucidi. As propostas para métodos sem derivadas de Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan [13] e de Cheng e Li [9] e a proposta de generalização de Yin e Du [37] também são buscas unidirecionais abordadas neste capítulo. O uso de buscas unidirecionais sem derivadas é relevante por aumentar consideravelmente a quantidade de problemas que podem ser resolvidos com a utilização de métodos de buscas unidirecionais. Mediante a utilização de funções forçantes, discutimos o critério de busca unidirecional de Yin e Du, que generaliza vários critérios que apresentamos nos Capítulos 3 e 4.

O Capítulo 5 tem como objetivo a comparação, utilizando a metodologia de [6], de todas as buscas apresentadas nos Capítulos 3 e 4, mediante experimentos numéricos com o método BFGS [8, 15, 18, 32] utilizando a coleção de problemas testes de Moré, Garbow e Hillstom [25]. Comparamos as buscas unidirecionais de acordo com a robustez e eficiência medida em quantidade de trabalho a fim de equilibrar as quantidades de avaliações de função e de gradiente utilizadas em cada iteração. E também, apontamos as melhores combinações de parâmetros em cada busca, analisando a dependência de cada parâmetro nas buscas testadas.

Finalmente, o Capítulo 6 contém as conclusões e intenções futuras.

Capítulo 2

REVISÃO DE CONCEITOS

A finalidade deste capítulo é apresentar definições e resultados clássicos utilizados neste trabalho. Na Seção 2.1, revisamos alguns conceitos de norma, da topologia do espaço \mathbb{R}^n e de funções, e exibimos resultados importantes que são utilizados no decorrer do texto. Na Seção 2.2, apresentamos conceitos e resultados relacionados a sequências no \mathbb{R}^n . Discutimos o problema geral estudado no trabalho e alguns resultados que garantem a existência de soluções na Seção 2.3. Na Seção 2.4, discutimos um Algoritmo Básico para Otimização, o método de Newton, e explicitamos o método Quase Newton BFGS. Alguns tipos de velocidade de convergência, como a convergência q e a convergência r , são discutidos na Seção 2.5. Na Seção 2.6, apresentamos alguns conceitos de convexidade de funções.

2.1 Topologia do \mathbb{R}^n

Muitos resultados apresentados nos Capítulos 3 e 4 necessitam de algumas hipóteses sobre a função a ser minimizada, sobre o conjunto de nível, e sobre a sequência gerada pelo algoritmo. Assim, revisamos alguns conceitos com intuito de esclarecê-los e fixar a notação. As referências básicas desta seção são [23, 30].

Definição 2.1 *Uma aplicação $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é denominada produto interno no espaço \mathbb{R}^n se para quaisquer $x, y, z \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$ temos*

PI1) $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$

PI2) $\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle$

PI3) $\langle cx, y \rangle = c\langle x, y \rangle$

PI4) $\langle x, x \rangle \geq 0$ e $\langle x, x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$.

Um exemplo importante de produto interno em \mathbb{R}^n é o produto interno canônico definido por

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i = x^T y, \quad (2.1)$$

onde $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ e $y = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$.

Definição 2.2 *Uma função real $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada norma em um espaço vetorial \mathbb{R}^n se para quaisquer $x, y \in \mathbb{R}^n$ e $c \in \mathbb{R}$ temos*

$$\mathbf{N1)} \quad \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$$

$$\mathbf{N2)} \quad \|cx\| = |c| \|x\|$$

$$\mathbf{N3)} \quad x \neq 0 \Rightarrow \|x\| > 0.$$

A norma definida por $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$, $\forall x \in \mathbb{R}^n$, é denominada norma induzida pelo produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Em particular, a norma $\|x\|_2 = \sqrt{x^T x}$, induzida pelo produto interno canônico (2.1), é denominada norma euclidiana.

Definição 2.3 *Dada uma norma vetorial $\|\cdot\|$, definimos a norma de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ como*

$$\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \{\|Ax\|\}.$$

Segue da definição de supremo que

$$\|A\| \geq \left\| A \left(\frac{x}{\|x\|} \right) \right\|$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n - \{0\}$, donde temos a desigualdade

$$\|Ax\| \leq \|A\| \|x\|, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n. \quad (2.2)$$

Agora enunciamos uma desigualdade importante que relaciona produtos internos com suas normas induzidas.

Proposição 2.4 *Desigualdade de Cauchy-Schwarz*

Seja $\langle \cdot, \cdot \rangle$ um produto interno e $\|\cdot\|$ a norma por ele induzida. Então, para quaisquer $x, y \in \mathbb{R}^n$, temos

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \|y\|.$$

Além disso, vale a igualdade se, e somente se, um dos vetores x, y é múltiplo escalar do outro.

Demonstração: Veja [23]. ■

Definição 2.5 Dizemos que duas normas $\|\cdot\|_a$ e $\|\cdot\|_b$ são equivalentes quando existem constantes $c, C \in \mathbb{R}$ tais que

$$c\|x\|_a \leq \|x\|_b \leq C\|x\|_a,$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Outro resultado importante é apresentado na sequência.

Teorema 2.6 Duas normas quaisquer no espaço \mathbb{R}^n são equivalentes.

Demonstração: Veja [23]. ■

Decorre do Teorema 2.6 que podemos desenvolver a teoria utilizando apenas a norma euclidiana, visto que os conceitos e resultados podem ser adaptados para qualquer outra norma. Utilizamos a partir de agora, salvo menção explícita, a notação $\|\cdot\|$ para nos referirmos à norma euclidiana $\|\cdot\|_2$. Agora, apresentamos dois resultados relacionados a normas de matrizes:

Proposição 2.7 Consideramos uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ com λ_1 e λ_n sendo, respectivamente, seu menor e maior autovalor. Então

$$\lambda_1\|x\|^2 \leq x^T A x \leq \lambda_n\|x\|^2$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Demonstração: Veja [30]. ■

Proposição 2.8 Consideramos uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ com autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Então

$$\|A\| = \max_{i=1, \dots, n} \{|\lambda_i|\}.$$

Demonstração: Veja [30]. ■

Vamos agora esclarecer alguns conceitos utilizados como hipóteses nos resultados teóricos que aparecem no decorrer do trabalho.

Definição 2.9 Sejam $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma função e $c \in \mathbb{R}$ uma constante arbitrária. Definimos o conjunto de nível de f em relação à constante c como sendo o conjunto

$$\Omega_c = \{x \in X; f(x) \leq c\}.$$

Uma hipótese bastante requisitada nos teoremas de convergência de métodos de Otimização é a exigência de que o conjunto de nível da função objetivo em relação a $f(x_0)$, onde x_0 é um ponto inicial da sequência gerada pelo método, seja um conjunto compacto. A definição de conjunto compacto requer os seguintes conceitos:

Definição 2.10 Dizemos que um conjunto X é limitado quando existe uma constante $R > 0$ tal que $\|x\| \leq R$ para todo $x \in X$.

Definição 2.11 Dizemos que um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ é um ponto de fronteira para um conjunto X quando para todo $\varepsilon > 0$ temos $(V(x, \varepsilon) - x) \cap X \neq \emptyset$ e $(V(x, \varepsilon) - x) \cap X^c \neq \emptyset$, onde $V(x, \varepsilon) = \{y \in \mathbb{R}^n; \|x - y\| \leq \varepsilon\}$. Ao conjunto de todos os pontos de fronteira de um conjunto X denominamos de fronteira de X e denotamos por ∂X .

Definição 2.12 Dizemos que um conjunto X é fechado quando contém sua fronteira.

Conhecendo as definições de conjunto limitado e fechado, podemos definir os conjuntos compactos no \mathbb{R}^n .

Definição 2.13 Dizemos que um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$ é compacto se é fechado e limitado.

Outra hipótese bastante requisitada nos resultados de convergência dos próximos capítulos é a exigência de que a função seja de classe C^1 ou C^2 e que a função gradiente seja Lipschitz contínua. Abaixo apresentamos estes conceitos e alguns resultados teóricos em que são necessários.

Definição 2.14 Seja $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma aplicação definida no conjunto X . Dizemos que f é contínua no ponto $a \in X$ quando para todo $\epsilon > 0$ existe $\delta > 0$ tal que $x \in X$, $\|x - a\| < \delta$ implique em $|f(x) - f(a)| < \epsilon$. Dizemos que f é contínua em X quando é contínua em todos os pontos de X .

Definição 2.15 Seja $F : X \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma aplicação definida em um conjunto X . Dizemos que F é Lipschitz contínua em X quando existe $L > 0$ (denominada constante de Lipschitz de F) tal que, para quaisquer $x, y \in X$ tem-se

$$\|F(x) - F(y)\| \leq L\|x - y\|.$$

Definição 2.16 Sejam $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida em um conjunto aberto X e um ponto $x \in X$. Definimos a i -ésima derivada parcial de f no ponto x (onde $1 \leq i \leq n$) como o limite

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + te_i) - f(x)}{t}$$

quando tal limite existe, onde os vetores e_i são os vetores canônicos do \mathbb{R}^n . Definimos a derivada direcional de f na direção d no ponto x como o limite

$$\frac{\partial f}{\partial d}(x) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + td) - f(x)}{t}$$

quando tal limite existe.

Definição 2.17 *Seja $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma função definida no aberto X . Dizemos que f é de classe C^1 se em cada ponto $x \in X$, as derivadas parciais $\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)$ existem e são contínuas. Em geral, dizemos que uma função $f : X \rightarrow \mathbb{R}$, definida no aberto X é de classe C^k quando ela admitir derivadas parciais em todos os pontos x de X e as n funções $\frac{\partial f}{\partial x_i} : X \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$, são de classe C^{k-1} . Dizemos que uma função $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ é de classe C^0 quando ela for contínua, e de classe C^∞ quando f for de classe C^k para todo $k \geq 0$.*

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^2 . Definimos o vetor gradiente e a matriz Hessiana de f avaliada em um ponto $x \in \mathbb{R}^n$, respectivamente, por

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n \text{ e } \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n}(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Se f é de classe C^1 , pode-se mostrar que a derivada direcional de f na direção d no ponto $x \in \mathbb{R}^n$ satisfaz

$$\frac{\partial f}{\partial d}(x) = \nabla f(x)^T d.$$

As fórmulas de Taylor e os teoremas do Valor médio e do Valor intermediário são resultados clássicos de Análise Matemática muito utilizados nas demonstrações de convergência de algoritmos de Otimização. Por esta razão, apresentamo-los a seguir.

Teorema 2.18 *Fórmula de Taylor de Primeira Ordem*

Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e $x_ \in \mathbb{R}^n$. Então*

$$f(x) = f(x_*) + \nabla f(x_*)^T (x - x_*) + r(x),$$

$$\text{com } \lim_{x \rightarrow x_*} \frac{r(x)}{\|x - x_*\|} = 0.$$

Demonstração: Veja [23]. ■

O polinômio $p(x) = f(x_*) + \nabla f(x_*)^T (x - x_*)$ é denominado polinômio de Taylor de primeira ordem.

Teorema 2.19 *Fórmula de Taylor de Segunda Ordem*

Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^2 e $x_ \in \mathbb{R}^n$. Então*

$$f(x) = f(x_*) + \nabla f(x_*)^T (x - x_*) + \frac{1}{2} (x - x_*)^T \nabla^2 f(x_*) (x - x_*) + r(x),$$

$$\text{com } \lim_{x \rightarrow x_*} \frac{r(x)}{\|x - x_*\|^2} = 0.$$

Demonstração: Veja [23]. ■

O polinômio $p(x) = f(x_*) + \nabla f(x_*)^T(x - x_*) + \frac{1}{2}(x - x_*)^T \nabla^2 f(x_*)(x - x_*)$ é denominado polinômio de Taylor de segunda ordem.

Teorema 2.20 *Teorema do Valor Intermediário*

Seja $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua definida em um conjunto $X \subset \mathbb{R}^n$. Se existem $a, b \in X$ e $d \in \mathbb{R}$ tais que $f(a) < d < f(b)$, então existe $c \in X$ tal que $f(c) = d$.

Demonstração: Veja [23]. ■

Teorema 2.21 *Teorema do Valor Médio*

Sejam $x_*, d \in \mathbb{R}^n$ e $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciável no segmento $(x_*, x_* + d)$. Então existe $t \in (0, 1)$ tal que

$$f(x_* + d) - f(x_*) = \nabla f(x_* + td)^T d.$$

Demonstração: Veja [23]. ■

Abaixo enunciamos uma outra versão do Teorema do Valor Médio que utiliza resto integral.

Teorema 2.22 *Teorema do Valor Médio com resto integral*

Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e $x_* \in \mathbb{R}^n$. Então

$$f(x) - f(x_*) = \int_0^1 \nabla f(x_* + t(x - x_*))^T (x - x_*) dt.$$

Demonstração: Veja [23]. ■

2.2 Sequências em \mathbb{R}^n

Conceitos envolvendo sequências são de fundamental importância em Otimização, uma vez que os algoritmos utilizados para resolver o problema (1.1) são iterativos, onde em cada iteração geramos um termo de uma sequência. As referências básicas desta sessão são [23, 30].

Definição 2.23 *Definimos sequência em \mathbb{R}^n como sendo uma aplicação $x : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}^n$. O valor que essa aplicação assume no número natural k , indicado por x_k , é denominado o k -ésimo termo da sequência. Denotamos uma sequência por $\{x_k\}$. Definimos uma subsequência de $\{x_k\}$ como uma restrição da sequência a um subconjunto infinito $\mathbb{N}' = \{k_1 < k_2 < \dots < k_i < \dots\} \subset \mathbb{N}$. Denotamos uma subsequência por $\{x_{k_i}\}$ ou por $\{x_k\}_{\mathbb{N}'}$.*

A noção de convergência e de limitação de sequências são exibidas abaixo.

Definição 2.24 Dizemos que uma sequência $\{x_k\}$ converge para um ponto x_* quando, para todo $\varepsilon > 0$, existe um índice $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que se $k \geq k_0$ temos

$$\|x_k - x_*\| < \varepsilon.$$

Denotamos este fato por $x_k \rightarrow x_*$ ou por $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x_*$. Caso contrário, dizemos que $\{x_k\}$ diverge.

Definição 2.25 Dizemos que uma sequência $\{x_k\}$ é limitada quando o conjunto formado pelos seus elementos é limitado, isto é, quando existe um número real $c > 0$ tal que $\|x_k\| \leq c$ para todo $k \in \mathbb{N}$.

Teorema 2.26 (Bolzano-Weierstrass) Toda sequência limitada em \mathbb{R}^n possui uma subsequência convergente.

Demonstração: Veja [23]. ■

Algumas sequências divergentes admitem subsequências convergentes, isto motiva a definição.

Definição 2.27 Dizemos que um ponto $x_* \in \mathbb{R}^n$ é um ponto de acumulação da sequência $\{x_k\}$ quando alguma subsequência de $\{x_k\}$ converge para x_* .

O limite inferior de uma sequência é utilizado para definições de velocidade de convergência discutidas na Seção 2.5.

Definição 2.28 Consideramos $\{x_k\} \subset \mathbb{R}$ uma sequência limitada. Definimos o limite inferior da sequência $\{x_k\}$ como o seu menor ponto de acumulação e denotamos por $\liminf_{k \rightarrow \infty} x_k$. Analogamente, definimos o limite superior da sequência como sendo o seu maior ponto de acumulação e denotamos por $\limsup_{k \rightarrow \infty} x_k$.

O conceito de monotonicidade de sequências é o que diferencia os critérios apresentados no Capítulo 3, que requerem que a sequência $\{f(x_k)\}$ seja monótona, dos critérios do Capítulo 4, que não exigem a monotonicidade da sequência $\{f(x_k)\}$. Explicitamos este conceito.

Definição 2.29 Dizemos que uma sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}$ é não decrescente quando $x_{k+1} \geq x_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$ e não crescente quando $x_{k+1} \leq x_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Dizemos que a sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}$ é crescente quando $x_{k+1} > x_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$ e decrescente quando $x_{k+1} < x_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Em qualquer uma destas situações, dizemos que a sequência $\{x_k\}$ é monótona.

A seguir, expomos um resultado sobre sequências bastante utilizado nas teorias de convergência de algoritmos que geram sequências monótonas.

Teorema 2.30 *Supomos que $\{x_k\}$ é uma sequência monótona que possui uma subsequência convergente, digamos $x_{k_i} \rightarrow x_*$. Então $x_k \rightarrow x_*$.*

Demonstração: Veja [30]. ■

2.3 Problema Geral

Em vias gerais, a Otimização estuda como encontrar pontos de mínimo ou de máximo de uma função sobre algum conjunto qualquer $X \subset \mathbb{R}^n$, isto é, visa resolver o seguinte problema

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & x \in X, \end{array} \quad (2.3)$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função objetivo arbitrária. Notamos que há equivalência, no sentido em que os conjuntos soluções dos problemas sejam iguais, entre os seguintes problemas

$$\begin{array}{ll} \text{maximizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & x \in X \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{ll} \text{minimizar} & -f(x) \\ \text{sujeito a} & x \in X \end{array}$$

e, por este motivo, restringimos nosso estudo ao problema (2.3).

Neste trabalho, estamos interessados em estudar e testar buscas unidirecionais utilizando um Algoritmo Quase Newton para resolver o problema irrestrito

$$\begin{array}{ll} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a} & x \in \mathbb{R}^n \end{array} ,$$

onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua, isto é, o problema (2.3) com $X = \mathbb{R}^n$.

Utilizamos esta seção para esclarecer estes termos. As referências básicas deste capítulo são [23, 30]. Começamos apresentando o conceito de uma solução para o problema (2.3).

Definição 2.31 *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e $x_* \in X \subset \mathbb{R}^n$. Dizemos que x_* é um minimizador local de f em X quando existe $\delta > 0$ tal que $f(x_*) \leq f(x)$ para todo $x \in V(x_*, \delta) \cap X$, onde $V(x_*, \delta) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x_*\| < \delta\}$. Caso $f(x_*) \leq f(x)$ para todo $x \in X$, dizemos que x_* é minimizador global de f em X . Dizemos que x_* é um minimizador local estrito de f em X quando existe $\delta > 0$ tal que $f(x_*) < f(x)$ para todo $x \in (V(x_*, \delta) - \{x_*\}) \cap X$. Caso $f(x_*) < f(x)$ para todo $x \in X$, dizemos que x_* é o minimizador global estrito de f em X .*

Um resultado importante que garante a existência de uma solução para o problema (2.3) decorre do seguinte resultado.

Teorema 2.32 *Teorema de Weierstrass*

Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e $X \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto compacto não vazio. Então f admite um minimizador global em X .

Demonstração: Veja [30]. ■

Corolário 2.33 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e suponhamos que existe $c \in \mathbb{R}$ tal que o conjunto de nível $\Omega_c = \{x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq c\}$ seja compacto e não vazio. Então f tem um minimizador global.*

Demonstração: Veja [30]. ■

As condições necessárias e suficientes para que um ponto seja uma solução para o problema (1.1) são exibidas a seguir.

Teorema 2.34 *Condição necessária de primeira ordem*

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável no ponto $x_ \in \mathbb{R}^n$ e suponhamos que x_* seja um minimizador local de f . Então*

$$\nabla f(x_*) = 0. \quad (2.4)$$

Demonstração: Veja [30]. ■

Definição 2.35 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável no ponto $x_* \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que x_* é um ponto crítico ou ponto estacionário da função f quando x_* satisfaz a condição (2.4).*

Consideramos $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = x^3$. Notamos que $x_* = 0$ satisfaz $\nabla f(x_*) = 3x_*^2 = 0$, mas que x_* não é ponto de mínimo local. Assim, ressaltamos que a igualdade (2.4) não implica em minimização. Entretanto, os algoritmos de Otimização ao resolver o problema (1.1) estão interessados em encontrar pontos estacionários.

Teorema 2.36 *Condição necessária de segunda ordem*

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes diferenciável no ponto $x_ \in \mathbb{R}^n$ e suponhamos que x_* seja um minimizador local de f . Então a matriz Hessiana de f no ponto x_* é semidefinida positiva, isto é,*

$$d^T \nabla^2 f(x_*) d \geq 0,$$

para todo $d \in \mathbb{R}^n$.

Demonstração: Veja [30]. ■

Teorema 2.37 *Condição suficiente de segunda ordem*

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes diferenciável no ponto $x_ \in \mathbb{R}^n$. Suponhamos que x_* seja um ponto estacionário da função f e que $\nabla^2 f(x_*)$ seja uma matriz definida positiva, isto é, $d^T \nabla^2 f(x_*) d > 0$ para todo $d \in \mathbb{R}^n - \{0\}$. Então x_* é minimizador local estrito de f .*

Demonstração: Veja [30]. ■

2.4 Algoritmos Básico e BFGS

Os algoritmos de Otimização visam resolver o problema (1.1) mediante um processo iterativo, gerando uma sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ que esperamos convergir para um ponto estacionário. Apresentamos, nesta seção, o Algoritmo Básico para resolver o problema (1.1), seguido por uma introdução ao método de Newton, e uma discussão sobre o método BFGS e algumas de suas propriedades. As referências básicas desta seção são [24, 30].

A partir esta seção, supondo que a sequência $\{x_k\}$ é gerada pela recorrência (1.2) para resolver o problema (1.1) utilizaremos a notação g_k para denotar o gradiente de f em x_k , isto é, $g_k = \nabla f(x_k)$.

Alguns termos presentes no Algoritmo 2.38 devem ser esclarecidos. Primeiro, podemos entender uma busca unidirecional, ou melhor, uma busca unidirecional na direção d_k a partir de x_k , como o processo de encontrar um comprimento para o passo α_k na direção de busca d_k , de modo que o próximo elemento da sequência, $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, gerada pelo algoritmo satisfaça algum critério, que varia de busca para busca. Discutimos nos Capítulos 3 e 4 critérios de buscas unidirecionais. Segundo, o termo direção de busca se refere à direção na qual vamos realizar a busca unidirecional. Em geral, métodos de Otimização definem diferentes direções de busca de acordo com as hipóteses que podem ser garantidas sobre a função do problema (1.1). A referência [30] é indicada para um estudo aprofundado das direções de busca fornecidas pelos métodos do Gradiente, de Newton, dos Quase Newton e dos Gradientes Conjugados.

Abaixo, exibimos um Algoritmo Básico (veja [30]) utilizado para resolver o problema irrestrito (1.1).

Algoritmo 2.38 *Algoritmo Básico*

Dados $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $k := 0$

REPITA enquanto $\nabla f(x_k) \neq 0$

 Calcule uma direção de busca $d_k \in \mathbb{R}^n$

 Escolha um comprimento do passo $\alpha_k \in [0, +\infty)$ por uma busca unidirecional

 Defina $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

$k := k + 1$

Como dito na introdução, os algoritmos de Otimização visam encontrar pontos estacionários para a função objetivo do problema (1.1), porém podem gerar sequências tais que algum ponto de acumulação não é ponto estacionário da função objetivo f . Definimos abaixo o conceito de algoritmos globalmente convergentes.

Definição 2.39 *Um algoritmo é denominado globalmente convergente quando para qualquer sequência $\{x_k\}$ gerada pelo algoritmo e qualquer ponto de acumulação x_* de $\{x_k\}$ temos que x_* é ponto estacionário.*

Notamos que este conceito está relacionado apenas ao algoritmo e não a uma sequência obtida para um problema específico. Podemos entender a definição como a exigência que

qualquer ponto de acumulação de qualquer sequência gerada pelo algoritmo seja um ponto estacionário.

Alguns métodos de Otimização geram o que chamamos de direções de descida, conceito que discutimos a seguir juntamente com uma propriedade utilizada na demonstração de alguns resultados de convergência dos Capítulos 3 e 4.

Definição 2.40 *Consideramos uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ e uma direção $d \in \mathbb{R}^n - \{0\}$. Dizemos que d é uma direção de descida para f a partir de x quando existe $\delta > 0$ tal que $f(x + td) < f(x)$ para todo $t \in (0, \delta)$.*

Decorre da definição que, se d é uma direção de descida para f a partir de x , f de classe C^1 , então

$$\nabla f(x)^T d \leq 0.$$

De fato, existe $\delta > 0$ tal que para todo $t \in (0, \delta)$ temos $f(x + td) < f(x)$. Logo, pela fórmula de Taylor de Primeira Ordem temos, para $t \in (0, \delta)$, que

$$f(x) + t\nabla f(x)^T d + r(t) < f(x),$$

com $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{r(t)}{t} = 0$. Ou seja, temos

$$\nabla f(x)^T d + \frac{r(t)}{t} < 0,$$

de onde, fazendo $t \rightarrow 0^+$, temos que

$$\nabla f(x)^T d \leq 0.$$

Assim, os vetores $\nabla f(x)$ e d formam um ângulo obtuso.

A seguir, apresentamos uma condição necessária para um direção ser de descida. A demonstração é baseada na referência [30], onde alguns detalhes são acrescentados.

Teorema 2.41 *Se $\nabla f(x)^T d < 0$, então d é uma direção de descida para f a partir de x .*

Demonstração: A derivada direcional de f na direção d é dada por

$$\nabla f(x)^T d = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + td) - f(x)}{t}.$$

Pela definição de limite e usando a hipótese do teorema, temos que, dado $\varepsilon = \frac{-\nabla f(x)^T d}{2} > 0$, existe $\delta > 0$ tal que, $\forall t \in (-\delta, \delta)$,

$$\left| \frac{f(x + td) - f(x)}{t} - \nabla f(x)^T d \right| < \frac{-\nabla f(x)^T d}{2},$$

ou seja,

$$\frac{\nabla f(x)^T d}{2} < \frac{f(x + td) - f(x)}{t} - \nabla f(x)^T d < \frac{-\nabla f(x)^T d}{2},$$

ou ainda

$$\frac{3\nabla f(x)^T d}{2} < \frac{f(x + td) - f(x)}{t} < \frac{\nabla f(x)^T d}{2}.$$

Logo, $\forall t \in (-\delta, \delta)$, temos que

$$\frac{f(x + td) - f(x)}{t} < \frac{\nabla f(x)^T d}{2} < 0,$$

e, portanto,

$$f(x + td) < f(x), \quad \forall t \in (0, \delta).$$

■

Discutimos agora o método Quase Newton com aproximação dada pela sugestão de Broyden, Fletcher, Goldfard e Shanno (BFGS) [8, 15, 18, 32], pois os resultados numéricos apresentados no Capítulo 5 são baseados neste método. Inicialmente, apresentamos o método de Newton, donde deriva a classe dos métodos Quase Newton.

Suponha que a função objetivo $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ do problema (1.1) é duas vezes continuamente diferenciável. Segundo o Teorema 2.34, para resolver (1.1) precisamos encontrar, se possível, uma solução do sistema potencialmente não linear de n equações e n incógnitas x_1, x_2, \dots, x_n (as coordenadas do ponto x) dado por

$$\nabla f(x) = 0. \tag{2.5}$$

Dado um vetor corrente x_k , consideramos a aproximação de $\nabla f(x)$ por seu polinômio de Taylor de primeira ordem, $\nabla f(x) \approx \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x - x_k)$. Temos que o sistema $\nabla f(x) = 0$ pode ser aproximado pelo sistema linear

$$\nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x - x_k) = 0.$$

Reescrevemos a equação acima como

$$\nabla^2 f(x_k)(x - x_k) = -\nabla f(x_k).$$

Supondo que $\nabla^2 f(x_k)$ seja inversível, temos que

$$x - x_k = -(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k),$$

e finalmente, temos uma solução aproximada de (2.5) dada por

$$x = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k).$$

Tomando $x = x_{k+1}$ e o comprimento do passo α_k unitário, temos, comparando com (1.2), que a direção de Newton é dada por

$$d_k = -(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k). \quad (2.6)$$

O algoritmo do método de Newton, retirado da referência [30], é um caso particular do Algoritmo 2.38 onde a direção d_k é calculada por (2.6).

Algoritmo 2.42 *Método de Newton*

Dados $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $k := 0$

REPITA enquanto $\nabla f(x_k) \neq 0$

Defina uma direção de busca d_k pela fórmula (2.6)

Escolha um comprimento do passo $\alpha_k \in [0, +\infty)$ por uma busca unidirecional

Defina $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

$k := k + 1$

Observação 2.43 Se a matriz $\nabla^2 f(x_k)$ é definida positiva, então a direção do método de Newton (2.6) é uma direção de descida para f em x_k .

De fato, mostramos que $g_k^T d_k < 0$. Temos que $g_k \neq 0$, pois caso contrário o algoritmo teria parado. Logo $g_k^T d_k = g_k^T (-(\nabla^2 f(x_k))^{-1} g_k) = -g_k^T (\nabla^2 f(x_k))^{-1} g_k < 0$, já que $\nabla^2 f(x_k)$ definida positiva implica que sua inversa $(\nabla^2 f(x_k))^{-1}$ é definida positiva.

O método de Newton possui ótimos resultados de convergência [30], mas computacionalmente o método é caro, pois envolve cálculos de Hessianas e de matrizes inversas. Na tentativa de melhorar o custo computacional do método de Newton surgem os métodos Quase Newton.

Os métodos Quase Newton têm o princípio de construir “aproximações” para a Hessiana ou para a inversa da Hessiana da função objetivo no ponto corrente, na tentativa de constituírem métodos com características semelhantes ao método de Newton, mas serem métodos computacionalmente mais baratos. O processo iterativo dos métodos Quase Newton utiliza as direções de buscas dadas por

$$d_k = -H_k g_k, \quad (2.7)$$

onde desejamos que a matriz $H_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ seja definida positiva e consideramos $g_k = \nabla f(x_k)$. O desejo da positividade da matriz H_k é justificada na seguinte observação.

Observação 2.44 Se a matriz H_k é definida positiva, então $d_k = -H_k g_k$ é uma direção de descida para f a partir de x_k .

De fato, mostramos que $g_k^T d_k < 0$. Temos que $g_k \neq 0$, pois caso contrário o algoritmo teria parado. Logo $g_k^T d_k = g_k^T (-H_k g_k) = -g_k^T H_k g_k < 0$, já que H_k é definida positiva.

A expressão (2.7) origina-se de aproximar a Hessiana de f em torno de x_k por uma matriz B_k , isto é, considerando o polinômio de segunda ordem para f em x_k dado por

$$p(d) = f(x_k) + g_k^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d,$$

onde $B_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica que aproxima $\nabla^2 f(x_k)$. E, supondo que B_k seja definida positiva, aplicando o raciocínio análogo ao aplicado ao método de Newton, obtemos

$$d_k = -B_k^{-1}g_k.$$

Podemos escolher então $H_k = B_k^{-1}$ isto é, H_k como sendo a matriz inversa de uma aproximação de $\nabla^2 f(x_k)$.

A atualização da matriz H_k pode ser feita de diversas maneiras. Desejamos que esta seja feita de maneira relativamente simples, para exigir menor esforço computacional. Uma das aproximações mais importantes da literatura é devido a Davidon, Fletcher e Powell [12, 16]. Porém, a atualização das matrizes H_k discutida nesta seção é motivada por Broyden, Fletcher, Goldfarb e Shanno (BFGS) que é a atualização utilizada nos testes computacionais do Capítulo 5.

A dedução do método BFGS apresentada nesta seção é baseada nas referências [24, 30]. Para deduzir a atualização do método BFGS, impomos que a atualização das matrizes Hessianas da função objetivo f satisfaçam a equação secante. Para explicitar essa imposição, consideramos em uma iteração k a aproximação da função $\nabla f(x)$ é dada por

$$L_k(x) = g_k + B_k(x - x_k),$$

onde B_k é uma aproximação para a Hessiana da função f . Escrevemos esta mesma aproximação para a iteração $k + 1$, donde temos que

$$\nabla f(x) \approx L_{k+1}(x) = g_{k+1} + B_{k+1}(x - x_{k+1}).$$

Utilizamos a ideia de uma aproximação secante impondo que a função $L_{k+1}(x)$ coincida com a função $\nabla f(x)$ nos pontos x_k e x_{k+1} , isto é,

$$L_{k+1}(x_{k+1}) = g_{k+1} \text{ e } L_{k+1}(x_k) = g_k.$$

A primeira condição $L_{k+1}(x_{k+1}) = g_{k+1}$ é satisfeita pela definição da função L_{k+1} . Para a segunda condição ser satisfeita, devemos ter que

$$g_k = L_{k+1}(x_k) = g_{k+1} + B_{k+1}(x_k - x_{k+1}).$$

Assim, para estabelecemos a atualização da matriz B_{k+1} , a ser determinada, requisitamos que ela satisfaça a condição

$$B_{k+1}p_k = q_k, \tag{2.8}$$

onde $p_k = x_{k+1} - x_k$ e $q_k = g_{k+1} - g_k$. A equação acima é chamada de equação secante. Podemos pensar que temos um sistema linear de n equações cuja as incógnitas são as n^2 entradas da matriz B_{k+1} . Assim, a solução é única apenas quando $n = 1$.

Diferentes escolhas dentre as soluções de (2.8) originam diferentes métodos. No entanto,

estamos interessados em soluções facilmente computáveis e tais que B_{k+1} , seja facilmente obtida partir de B_k , no sentido que realize pouco esforço computacional. Dessa maneira, consideramos $B_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definida positiva e suponhamos que $p_k^T q_k > 0$. Vamos procurar uma solução para (2.8) que seja uma correção de posto dois a partir de B_k , ou seja, queremos encontrar uma matriz B_{k+1} tal que $\Delta B_k = B_{k+1} - B_k$ tenha posto dois. Para tanto, devem existir escalares $a_k, b_k \in \mathbb{R}$ e vetores $u_k, v_k \in \mathbb{R}^n$ tais que

$$B_{k+1} = B_k + a_k u_k u_k^T + b_k v_k v_k^T, \quad (2.9)$$

donde, obtemos

$$q_k = B_{k+1} p_k = (B_k + a_k u_k u_k^T + b_k v_k v_k^T) p_k = B_k p_k + a_k (u_k^T p_k) u_k + b_k (v_k^T p_k) v_k.$$

Escolhendo

$$a_k (u_k^T p_k) u_k = q_k \quad \text{e} \quad b_k (v_k^T p_k) v_k = -B_k p_k, \quad (2.10)$$

temos que a condição (2.8) é satisfeita. Multiplicando à esquerda por p_k^T estas escolhas, obtemos

$$a_k (u_k^T p_k)^2 = p_k^T q_k \quad \text{e} \quad b_k (v_k^T p_k)^2 = -p_k^T B_k p_k. \quad (2.11)$$

Tomando, por exemplo, $a_k = 1$ e $b_k = -1$, de (2.10), obtemos

$$u_k = \frac{q_k}{u_k^T p_k} \quad \text{e} \quad v_k = \frac{B_k p_k}{v_k^T p_k} \quad (2.12)$$

e de (2.11) temos que

$$u_k^T p_k = \sqrt{p_k^T q_k} \quad \text{e} \quad v_k^T p_k = \sqrt{p_k^T B_k p_k}. \quad (2.13)$$

Portanto, substituindo (2.13) em (2.12), obtemos

$$u_k = \frac{q_k}{\sqrt{p_k^T q_k}} \quad \text{e} \quad v_k = \frac{B_k p_k}{\sqrt{p_k^T B_k p_k}}. \quad (2.14)$$

Portanto, substituindo (2.14) em (2.9), juntamente com $a_k = 1$ e $b_k = -1$, obtemos a matriz aproximação para a Hessiana de f no ponto x_{k+1} dada por

$$B_{k+1} = B_k + \frac{q_k q_k^T}{p_k^T q_k} - \frac{B_k p_k p_k^T B_k}{p_k^T B_k p_k}. \quad (2.15)$$

Como discutido anteriormente, o método BFGS consiste em encontrar H_{k+1} como a inversa da aproximação B_{k+1} , isto é, $H_{k+1} = (B_{k+1})^{-1}$, de modo que a direção de busca seja dada pela expressão (2.7). O problema agora, passa ser o cálculo da inversa da aproximação B_{k+1} . Podemos calculá-las através da fórmula de Sherman-Morrison.

Proposição 2.45 *Fórmula da Sherman-Morrison*

Suponhamos que a matriz $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ seja inversível e que $x, y \in \mathbb{R}^n$ sejam vetores arbitrários. A matriz $M + xy^T$ é inversível se, e somente se, $1 + y^T M^{-1} x \neq 0$. Além disso, vale

$$(M + xy^T)^{-1} = M^{-1} - \frac{M^{-1}xy^T M^{-1}}{1 + y^T M^{-1}x}. \quad (2.16)$$

Demonstração: Veja [30]. ■

Observamos que definindo $Q_k := B_k + \frac{q_k q_k^T}{p_k^T q_k}$, temos que Q_k é definida positiva, pois é a soma de duas matriz definidas positivas e, portanto, inversível. Assim, aplicando a fórmula de Sherman-Morrison (2.16) com $M = B_k$, $x = \frac{q_k}{p_k^T q_k}$ e $y = q_k$, obtemos

$$Q_k^{-1} = \left(B_k + \frac{q_k q_k^T}{p_k^T q_k} \right)^{-1} = B_k^{-1} - \frac{B_k^{-1} q_k q_k^T B_k^{-1}}{p_k^T q_k + q_k^T B_k^{-1} q_k},$$

e como $B_k^{-1} = H_k$, temos

$$Q_k^{-1} = H_k - \frac{H_k q_k q_k^T H_k}{p_k^T q_k + q_k^T H_k q_k}. \quad (2.17)$$

Definindo $r_k = p_k^T q_k + q_k^T H_k q_k$, multiplicando (2.17) à direita, à esquerda, e à direita e esquerda por B_k , respectivamente, obtemos

$$Q_k^{-1} B_k = I - \frac{H_k q_k q_k^T}{r_k}, \quad (2.18)$$

$$B_k Q_k^{-1} = I - \frac{q_k q_k^T H_k}{r_k}, \quad (2.19)$$

$$B_k Q_k^{-1} B_k = B_k - \frac{q_k q_k^T}{r_k}. \quad (2.20)$$

Consideramos, $u_k = -\frac{B_k p_k}{p_k^T B_k p_k}$ e $v_k = B_k p_k$. Temos, comparando Q_k com (2.15), que

$$B_{k+1} = Q_k + u_k v_k^T. \quad (2.21)$$

Substituindo u_k e v_k e usando a igualdade (2.20), temos que

$$\begin{aligned} 1 + v_k^T Q^{-1} u_k &= \frac{p_k^T B_k p_k - p_k^T B_k Q^{-1} B_k p_k}{p_k^T B_k p_k} \\ &= \frac{p_k^T B_k p_k - p_k^T \left(B_k - \frac{q_k q_k^T}{r_k} \right) p_k}{p_k^T B_k p_k} \\ &= \frac{(p_k^T q_k)^2}{r_k (p_k^T B_k p_k)} \neq 0. \end{aligned}$$

Portanto, podemos aplicar novamente a fórmula de Sherman-Morrison em (2.21). Analogamente, considerando $M = Q$, $x = u_k$ e $y = v_k$, obtemos

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= (B_{k+1})^{-1} \\ &= Q_k^{-1} - \frac{Q_k^{-1} u_k v_k^T Q_k^{-1}}{1 + v_k^T Q_k^{-1} u_k} \\ &= Q_k^{-1} + \frac{r_k (Q_k^{-1} B_k p_k p_k^T B_k Q_k^{-1})}{(p_k^T q_k)^2}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Pelas igualdades (2.18) e (2.19), temos que

$$\begin{aligned} r_k (Q_k^{-1} B_k p_k p_k^T B_k Q_k^{-1}) &= r_k \left(I - \frac{H_k q_k q_k^T}{r_k} \right) p_k p_k^T \left(I - \frac{H_k q_k q_k^T}{r_k} \right) \\ &= r_k p_k p_k^T - p_k^T q_k (p_k q_k^T H_k + H_k q_k p_k^T) + \frac{(p_k^T q_k)^2}{r_k} H_k q_k q_k^T H_k. \end{aligned}$$

Finalmente, substituindo esta última igualdade, com (2.17) em (2.22), temos que

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= \left(H_k - \frac{H_k q_k q_k^T H_k}{p_k^T q_k + q_k^T H_k q_k} \right) \\ &+ \frac{\left(r_k p_k p_k^T - p_k^T q_k (p_k q_k^T H_k + H_k q_k p_k^T) + \frac{(p_k^T q_k)^2}{r_k} H_k q_k q_k^T H_k \right)}{(p_k^T q_k)^2} \\ &= H_k - \frac{H_k q_k q_k^T H_k}{p_k^T q_k + q_k^T H_k q_k} \\ &+ \frac{(p_k^T q_k + q_k^T H_k q_k) p_k p_k^T}{(p_k^T q_k)^2} - \frac{(p_k q_k^T H_k + H_k q_k p_k^T)}{p_k^T q_k} + \frac{H_k q_k q_k^T H_k}{(p_k^T q_k + q_k^T H_k q_k)} \\ &= H_k + \left(1 + \frac{q_k^T H_k q_k}{p_k^T q_k} \right) \frac{p_k p_k^T}{p_k^T q_k} - \frac{p_k q_k^T H_k + H_k q_k p_k^T}{p_k^T q_k}. \end{aligned}$$

Deste modo, obtemos a fórmula de atualização do método do BFGS dada por

$$H_{k+1}^{BFGS} = H_k + \left(1 + \frac{q_k^T H_k q_k}{p_k^T q_k} \right) \frac{p_k p_k^T}{p_k^T q_k} - \frac{p_k q_k^T H_k + H_k q_k p_k^T}{p_k^T q_k}. \quad (2.23)$$

Apresentamos abaixo um resultado, retirado da referência [24], que garante que toda matriz atualizada pelo BFGS é definida positiva.

Teorema 2.46 *Na fórmula BFGS (2.23), se H_k é simétrica definida positiva e $p_k^T q_k > 0$, então H_{k+1} também é simétrica e definida positiva.*

Demonstração: Seja $z \neq 0, z \in \mathbb{R}^n$, e consideramos $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$. Então

$$z^T B_{k+1} z = z^T B_k z + \frac{(z^T p_k)^2}{p_k^T q_k} - \frac{(z^T B_k q_k)^2}{q_k^T B_k q_k},$$

onde $z^T B_k z > 0$ já que a inversa de $B_k^{-1} = H_k$ é definida positiva e $\frac{(z^T p_k)^2}{p_k^T q_k} \geq 0$, por hipótese. Fazendo

$$a = z^T B_k z - \frac{(z^T B_k q_k)^2}{q_k^T B_k q_k} = \frac{q_k^T B_k q_k z^T B_k z - (z^T B_k q_k)^2}{q_k^T B_k q_k}, \quad (2.24)$$

temos que, pela desigualdade de Cauchy Schwarz,

$$z^T B_k q_k = \langle z, q_k \rangle_{B_k} \leq \|z\|_{B_k} \|q_k\|_{B_k} = \sqrt{z^T B_k z} \sqrt{q_k^T B_k q_k}, \quad (2.25)$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle_{B_k}$ e $\|\cdot\|_{B_k}$ são, respectivamente, o produto interno e a norma induzida pela matriz B_k . Logo, de (2.25), temos que

$$(z^T B_k q_k)^2 \leq z^T B_k z q_k^T B_k q_k,$$

e como $q_k^T B_k q_k > 0$, temos por (2.24), que $a \geq 0$. Observamos que se z é múltiplo de q_k , então pelo Teorema 2.4 temos que (2.25) é uma igualdade e, por (2.24), segue que $a = 0$. Porém, neste caso, como $z = cq_k$, $c \in \mathbb{R}^*$ e $p_k^T q_k > 0$, temos que $z^T p_k = cq_k^T p_k \neq 0$. Assim $z^T B_{k+1} z = a + \frac{(z^T p_k)^2}{p_k^T q_k} > 0$ para todo $z \neq 0$, donde B_{k+1} é definida positiva. Portanto, H_{k+1}^{-1} é definida positiva, o que implica que H_{k+1} é definida positiva. ■

O algoritmo do método BFGS consiste do Algoritmo Básico onde a direção é dada (2.7) com as matrizes H_k atualizadas por (2.23) e é realizado o teste do Teorema 2.46 com a finalidade de utilizarmos matrizes definidas positivas e simétricas.

Algoritmo 2.47 *Algoritmo BFGS*

Dados $x_0 \in \mathbb{R}^n$, H_0 simétrica definida positiva e $k := 0$

REPITA enquanto $\nabla f(x_k) \neq 0$

Defina a direção de busca $d_k = -H_k \nabla f(x_k)$

Escolha um comprimento do passo $\alpha_k \in [0, +\infty)$ por uma busca unidirecional

Defina $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

SE $p_k^T q_k > 0$

Atualize H_{k+1} pela fórmula (2.23)

CASO CONTRÁRIO

Escolha uma matriz H_{k+1} simétrica definida positiva

$k := k + 1$

A seguir, apresentamos hipóteses direcionais que são amplamente utilizadas em resultados teóricos dos Capítulos 3 e 4. Consideramos a sequência $\{x_k\}$ definida pela recorrência (1.2). Uma hipótese, muito comum, que aparecerá nos próximos capítulos é que existam escalares positivos c_1 e c_2 tais que

$$g_k^T d_k \leq -c_1 \|g_k\|^2 \quad (2.26)$$

e

$$\|d_k\| \leq c_2 \|g_k\| \quad (2.27)$$

para todo $k \in \mathbb{N}$.

Uma outra hipótese, que aparece em outros algoritmos, é a exigência de um escalar positivo c_3 tal que, para todo $k \in \mathbb{N}$, temos

$$\cos \theta_k \geq c_3, \quad (2.28)$$

onde θ_k é ângulo entre d_k e a direção descida mais íngreme $-g_k$, definido por

$$\cos \theta_k = \frac{-g_k^T d_k}{\|g_k\| \|d_k\|}. \quad (2.29)$$

O próximo teorema relaciona estas hipóteses direcionais.

Teorema 2.48 *Se existem constantes positivas c_1 e c_2 tais que as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) são satisfeitas, então existe $c_3 > 0$ satisfazendo a hipótese direcional (2.28).*

Demonstração: De fato, segue de (2.26) que $-g_k^T d_k \geq c_1 \|g_k\|^2$, e de (2.27) que $\frac{1}{\|d_k\|} \geq \frac{1}{c_2 \|g_k\|}$. Logo

$$\begin{aligned} \cos \theta_k &= \frac{-g_k^T d_k}{\|g_k\| \|d_k\|} \\ &\geq \frac{c_1 \|g_k\|^2}{c_2 \|g_k\| \|g_k\|} \\ &= \frac{c_1}{c_2}, \end{aligned}$$

para todo k . Portanto, existe $c_3 = \frac{c_1}{c_2} > 0$ tal que (2.28) é satisfeita. ■

O seguinte teorema, que demonstramos, relaciona as matrizes geradas pelo método BFGS com as hipóteses direcionais.

Teorema 2.49 *Suponhamos que as matrizes H_k geradas pela atualização BFGS sejam definidas positivas com autovalores uniformemente limitados. Isto é, se $\lambda_i(H_k)$, $i = 1, 2, \dots, n$, são os autovalores da matriz H_k então estamos supondo que existem constantes positivas λ e Λ tais que*

$$0 < \lambda \leq \lambda_i(H_k) \leq \Lambda, \quad (2.30)$$

para todo $i = 1, 2, \dots, n$ e todo $k \in \mathbb{N}$. Se as direções d_k são dadas por (2.7), então existem números positivos c_1 e c_2 tais que as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) são satisfeitas. Além disso, como consequência do Teorema 2.48, existe c_3 tal que a hipótese direcional (2.28) é satisfeita.

Demonstração: De fato, utilizando a Proposição 2.7, temos que

$$-g_k^T d_k = g_k^T H_k g_k \geq \lambda \|g_k\|^2.$$

Portanto, existe $c_1 = \lambda$ tal que

$$g_k^T d_k \leq -\lambda \|g_k\|^2.$$

Para mostrar a existência de $c_2 > 0$, utilizamos novamente a Proposição 2.7, temos que

$$\|d_k\| = \|-H_k g_k\| \leq \|H_k\| \|g_k\| = \max_{i=1,\dots,n} \{|\lambda_i(H_k)|\} \|g_k\| \leq \Lambda \|g_k\|.$$

Portanto, existe $c_2 = \Lambda$ tal que

$$\|d_k\| \leq c_2 \|g_k\|.$$

■

Terminamos esta seção notando que, em virtude dos Teoremas 2.6 e 2.8, se as matrizes H_k dadas pela atualização BFGS são definidas positivas com autovalores uniformemente limitados, temos, para uma norma arbitrária, a seguinte limitação

$$\lambda_a \leq \|H_k\| \leq \Lambda_a, \quad \forall k \in \mathbb{N}, \text{ para } 0 < \lambda_a \leq \Lambda_a, \quad (2.31)$$

o que implica que a sequência $\{H_k\}$ está em um conjunto compacto.

2.5 Velocidade de Convergência

Existem vários tipos de velocidades com as quais uma sequência pode convergir. Apresentamos, nesta seção, as velocidades q e r , que são utilizadas no decorrer deste trabalho. As definições e exemplos apresentados nessa seção, são baseados em [27].

2.5.1 Convergência q

Definição 2.50 *Consideramos uma sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ convergente para $x_* \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que $\{x_k\}$ converge q -linearmente com razão de convergência $m \in [0, 1)$ quando*

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} = m.$$

O prefixo ‘ q ’ significa que a velocidade de convergência é definida em termos do “quociente” dos erros sucessivos.

Exemplo 2.51 *A sequência $\{x_k\}$ dada por $x_k = \left(\frac{1}{2}\right)^k$ para todo $k \in \mathbb{N}$ converge q -linearmente para $x_* = 0$.*

De fato, notamos que

$$\frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} = \frac{\left(\frac{1}{2}\right)^{k+1}}{\left(\frac{1}{2}\right)^k} = \frac{1}{2}$$

e logo, tomando limite em ambos os membros, obtemos

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} = \frac{1}{2} < 1.$$

Definição 2.52 Consideramos uma sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ convergente para $x_* \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que $\{x_k\}$ converge q -superlinearmente quando

$$\frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} \rightarrow 0.$$

Exemplo 2.53 A sequência $\{x_k\}$ dada por $x_k = e^{-k^2}$ para todo $k \in \mathbb{N}$ converge q -superlinearmente para zero.

De fato, notamos que

$$\frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} = \frac{e^{-(k+1)^2}}{e^{-k^2}} = e^{-(2k+1)}$$

e logo, tomando limite em ambos os membros, obtemos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} = \lim_{k \rightarrow \infty} e^{-(2k+1)} = 0.$$

Definição 2.54 Consideramos uma sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ convergente para $x_* \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que $\{x_k\}$ converge q -quadraticamente para x_* quando existe uma constante $M > 0$ tal que

$$\frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|^2} \leq M.$$

Pode-se provar que, se $\{x_k\}$ tem convergência quadrática q para x_* , então $\{x_k\}$ converge q -superlinearmente para x_* . Se $\{x_k\}$ tem convergência q -superlinear para x_* , então $\{x_k\}$ converge q -linearmente para x_* .

Exemplo 2.55 A sequência $\{x_k\}$ dada por $x_k = \left(\frac{1}{2}\right)^{2^k}$ para todo $k \in \mathbb{N}$ converge q -quadraticamente para zero.

De fato, notamos que para todo $k \in \mathbb{N}$ temos

$$\begin{aligned} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|^2} &= \frac{\left(\frac{1}{2}\right)^{2^{k+1}}}{\left(\frac{1}{2}\right)^{2^k}} \\ &= \frac{\left(\frac{1}{2}\right)^{2(2^k)}}{\left(\frac{1}{2}\right)^{2^k}} \\ &= \left(\frac{1}{2}\right)^{2(2^k) - 2^k} \\ &= \left(\frac{1}{2}\right)^{2^k} \leq \frac{1}{2} \end{aligned}$$

e logo, tomando $M = \frac{1}{2}$ temos que a convergência é q -quadrática.

Em geral, definimos ordem da convergência q como segue.

Definição 2.56 *Seja $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ uma sequência convergente para x_* . Dizemos que a velocidade de convergência é q de ordem p ($p > 1$) quando existe uma constante $M > 0$ tal que*

$$\frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|^p} \leq M.$$

2.5.2 Convergência r

Definição 2.57 *Consideramos uma sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ convergente para $x_* \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que $\{x_k\}$ converge r -linearmente com razão de convergência $m \in [0, 1)$ se existe uma sequência de escalares não negativos $\{v_k\}$ tal que $\|x_k - x_*\| \leq v_k$, para todo $k \in \mathbb{N}$ e $\{v_k\}$ converge q -linearmente para zero. Dizemos que a sequência $\{\|x_k - x_*\|\}$ é dominada por $\{v_k\}$.*

O prefixo ‘ r ’ significa “raiz”, e a definição compara a sequência de erros com uma sequência de escalares não negativos que converge para zero com velocidade de convergência q .

Exemplo 2.58 *A sequência $\{x_k\}$, $k = 1, 2, 3, \dots$, dada por*

$$x_k = \begin{cases} \left(\frac{1}{2}\right)^k & \text{se } k \text{ é par} \\ \left(\frac{1}{2}\right)^{k+1} & \text{se } k \text{ é ímpar} \end{cases}$$

converge para $x_ = 0$ com velocidade r -linear.*

De fato, consideramos a sequência de escalares não negativos $\{v_k\}$ dada por $v_k = \left(\frac{1}{2}\right)^k$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Pelo Exemplo 2.51 temos que esta sequência tem convergência q -linear, também $\|x^k - x_\| \leq v_k$ para $k = 1, 2, 3, \dots$, portanto, temos que $\{x_k\}$ tem convergência r -linear.*

A próxima observação relaciona as convergências q e r .

Observação 2.59 *Uma sequência que converge q -linearmente converge r -linearmente. A recíproca é falsa.*

Notamos que, se $\{x_k\}$ converge q -linearmente para x_ , então tomando $\{v_k\} = \{\|x_k - x_*\|\}$ temos a convergência r -linear de $\{x_k\}$ para x_* . Reciprocamente, a sequência do Exemplo 2.58 converge r -linearmente para $x_* = 0$, mas não q -linearmente para x_* , pois*

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|} = 1 \notin [0, 1).$$

Definição 2.60 *Consideramos uma sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ convergente para $x_* \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que $\{x_k\}$ converge r -superlinearmente para x_* se existe uma sequência de escalares não negativos $\{v_k\}$ tal que $\|x_k - x_*\| \leq v_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$ e $\{v_k\}$ converge q -superlinearmente para zero.*

Definição 2.61 Consideramos uma sequência $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ convergente para $x_* \in \mathbb{R}^n$. Dizemos que $\{x_k\}$ converge r -quadraticamente para x_* se existe uma sequência de escalares não negativos $\{v_k\}$ tal que $\|x_k - x_*\| \leq v_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$ e $\{v_k\}$ converge q -quadraticamente para zero.

2.6 Convexidade de funções

As definições e teoremas desta seção são retiradas das referências [4, 5, 28, 30]. Formalizamos alguns conceitos de classes de funções envolvendo convexidade. Estes conceitos aparecem em resultados de velocidade de convergência nos próximos capítulos.

Definição 2.62 Dizemos que um conjunto X é convexo quando dados $x, y \in X$, temos que $(1-t)x + ty \in X$ para todo $t \in [0, 1]$.

Definição 2.63 Consideramos um conjunto X convexo. Dizemos que uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é convexa em X quando

$$f((1-t)x + ty) \leq (1-t)f(x) + tf(y),$$

para todos $x, y \in X$ e $t \in [0, 1]$. Dizemos que f é estritamente convexa em X quando

$$f((1-t)x + ty) < (1-t)f(x) + tf(y),$$

para todos $x, y \in X$ distintos e $t \in (0, 1)$.

Teorema 2.64 Sejam $X \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo, $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ uma função convexa e suponhamos que $x_* \in X$ é um minimizador local de f . Então x_* é minimizador global de f .

Demonstração: Veja [30]. ■

Teorema 2.65 Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e X um conjunto convexo. A função f é convexa em X se, e somente se,

$$f(y) - f(x) \geq \nabla f(x)^T(y - x)$$

para todos $x, y \in X$.

Demonstração: Veja [30]. ■

Definição 2.66 Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável. Dizemos que f é fortemente convexa com parâmetro τ se

$$(\nabla f(x) - \nabla f(y))^T(x - y) \geq \frac{\tau}{2}\|x - y\|^2,$$

para todos $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Teorema 2.67 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável. Então as seguintes afirmações são equivalentes*

a) f é fortemente convexa com parâmetro τ .

b) Para todo $x, y \in \mathbb{R}^n$,

$$f(y) - f(x) \geq \nabla f(y)^T(y - x) - \tau\|x - y\|^2. \quad (2.32)$$

c) Para todo $x, y \in \mathbb{R}^n$, $t \in (0, 1)$,

$$f((tx + (1 - t)y)) \leq tf(x) + (1 - t)f(y) - \tau t(1 - t)\|x - y\|^2.$$

Demonstração: Veja [28]. ■

Observamos pelo item b) do teorema acima que toda função fortemente convexa é convexa, e que pelo Teorema 2.64, se f é fortemente convexa e x_* é minimizador local de f , então x_* é um minimizador global de f . Além disso, decorre da definição de fortemente convexa que, se x_* é o único minimizador de f , temos para todo $x \in \mathbb{R}^n$ que

$$\|x - x_*\|^2 \leq \frac{2}{\tau}(\nabla f(x) - \nabla f(x_*))^T(x - x_*) \leq \frac{2}{\tau}\|\nabla f(x)\|\|x - x_*\|.$$

Portanto, se x_* é um minimizador local de uma função fortemente convexa f , temos que

$$\|x - x_*\| \leq \frac{2}{\tau}\|\nabla f(x)\|$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

A seguir definimos dois conceitos de função uniformemente convexa. A definição abaixo pode ser encontrada em [4] e relaciona as funções uniformemente convexas com fortemente convexas.

Definição 2.68 *Dizemos que uma função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uniformemente convexa com módulo $\phi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ se ϕ é crescente, se anula somente em 0, e além disso,*

$$f(tx + (1 - t)y) + t(1 - t)\phi(\|x - y\|) \leq tf(x) + (1 - t)f(y)$$

para todos $x, y \in \mathbb{R}^n$ e $t \in (0, 1)$.

Notamos que, se f é uniformemente convexa e tomamos $\phi(t) = \tau\|t\|$, então temos que f é fortemente convexa. Uma outra definição de função uniformemente convexa para funções diferenciáveis, dada em [11] é a seguinte:

Definição 2.69 Dizemos que uma função f diferenciável é uniformemente convexa se existem constantes positivas $\underline{\tau}$ e $\bar{\tau}$ tais que

$$\underline{\tau}||x - y||^2 \leq (x - y)^T(\nabla f(x) - \nabla f(y)) \leq \bar{\tau}||x - y||^2,$$

para todos $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Capítulo 3

BUSCAS UNIDIRECIONAIS MONÓTONAS

Como dito na introdução, estamos interessados em resolver o problema de minimização irrestrito (1.1), onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função continuamente diferenciável. Estamos sempre supondo que a sequência de iterandos é gerada pela fórmula (1.2), onde d_k é uma direção de descida gerada por um método de minimização de uma função de várias variáveis e α_k é o comprimento do passo obtido por alguma busca unidirecional. Lembramos que uma busca unidirecional monótona consiste em determinar comprimento do passo tal que a sequência $\{f(x_k)\}_{k \in \mathbb{N}}$ seja monótona decrescente conforme a Definição 2.29. Uma busca unidirecional que não impõe esta última afirmação é chamada de busca unidirecional não monótona. Abordamos estas buscas unidirecionais no Capítulo 4.

Discutimos neste capítulo as buscas unidirecionais monótonas, apresentando seus resultados de convergência. As referências básicas deste capítulo são [26, 29, 30, 34, 39]. Analisamos primeiramente as buscas unidirecionais clássicas, que geralmente estão presentes em livros aprofundados de Otimização: as buscas de Armijo [2], de Wolfe [35, 36], de Wolfe Forte [35, 36] e de Goldstein [19]. Além dessas, apresentamos as buscas de Shi e Shen [34] e de Zhen, Zhou e Li [39] que encontramos em uma busca por periódicos da área. Discutimos também procedimentos para obtenção do comprimento do passo que satisfaça cada critério.

Iniciamos nossa discussão com dois critérios que justificam a importância da utilização de buscas unidirecionais, o critério puro e o decréscimo simples são abordados, respectivamente, nas Seções 3.1 e 3.2. Depois, apresentamos nas Seções 3.3, 3.4, 3.5 e 3.6 as buscas unidirecionais clássicas de Armijo, de Wolfe, de Wolfe Forte e de Goldstein, respectivamente. A busca monótona de Shi e Shen é tratada na Seção 3.7 e a de Zhen, Zhou e Li na Seção 3.8.

3.1 Critério Puro

Uma questão aparece naturalmente ao se falar de processos de busca unidirecionais: É necessária a realização de uma busca unidirecional para garantir a convergência global de um método? A não utilização de uma busca unidirecional é o que chamaremos de critério puro, isto é, *o critério puro consiste em obter um comprimento do passo α_k tomando*

$$\alpha_k = 1, \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Porém a resposta da questão é que as buscas unidirecionais são necessárias para garantir convergências globais, visto que alguns métodos clássicos como Newton, Quase Newton, Newton Inexato, só convergem localmente, isto é, quando o ponto inicial está relativamente próximo a solução. No exemplo abaixo podemos observar casos onde o uso do passo completo não garante convergência para pontos estacionários.

Exemplo 3.1 *Consideramos a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = \frac{1}{2}x^4$ e usamos a recorrência (1.2) com a direção dada por $d_k = -g_k = -2x_k^3$ e o comprimento do passo obtido pelo critério puro. Definindo $x_0 = 1$ como ponto inicial produzimos pela recorrência (1.2) a sequência $\{x_k\} = (1, -1, 1, -1, \dots)$ e assim, temos que os pontos de acumulação da sequência $\{x_k\}$ não são pontos estacionários da função f . Além disso, definindo o ponto inicial como $y_0 = 2$, temos pela recorrência (1.2) a sequência $\{y_k\} = (2, -14, 5474, \dots)$, que claramente é divergente e não possui nenhum ponto de acumulação.*

Observamos, que como demonstrado no exemplo, o critério puro não é um critério de busca monótona, pois admite iterandos que aumentam o valor da função. O exemplo ilustra, também, o fato que sequências divergentes e sequências com pontos de acumulação que não são pontos estacionários para a função objetivo do problema (1.1) poderiam ser gerados por métodos que não utilizam buscas unidirecionais. Portanto, muitas vezes a utilização de buscas unidirecionais são fundamentais para garantir alguma convergência para o método em questão.

3.2 Critério de Decréscimo Simples

Nesta seção, discutimos o critério de decréscimo simples, que denominaremos abreviadamente como critério **DecS**. Ao resolver o problema (1.1) requisitamos que as imagens dos iterandos gerados por um método formem uma sequência decrescente. Desta forma, o método gera uma sequência cujos valores de função diminuem ao longo das iterações e logo esperamos encontrar um ponto solução para o problema (1.1).

O critério de decréscimo simples utiliza esta ideia, isto é, *o critério de decréscimo simples consiste em obter um comprimento do passo α_k tal que o próximo iterando gerado pela*

fórmula (1.2) satisfaça a condição

$$f(x_{k+1}) < f(x_k). \quad (3.1)$$

Consideramos nesse trabalho a restrição φ da função objetivo f na direção d_k a partir de x_k , ou seja, consideramos a função $\varphi : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $\varphi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k)$, e denominamos por conjunto admissível o conjunto dos comprimentos de passos que satisfazem a condição de uma determinada busca unidirecional. A representação geométrica do Decréscimo Simples é dada na Figura 3.1.

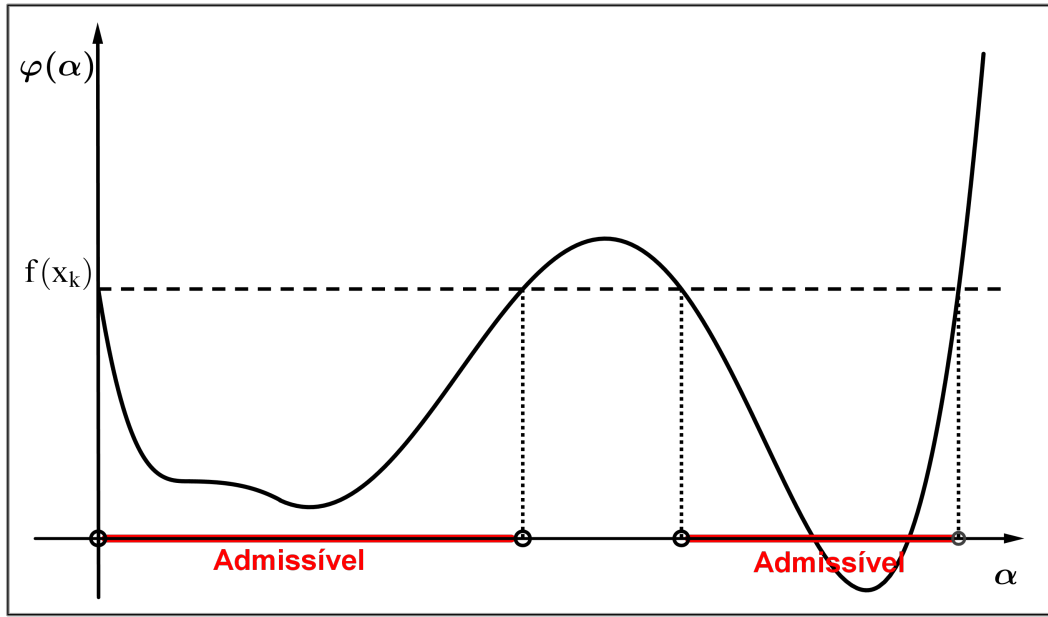


Figura 3.1: Conjunto admissível para o critério de decréscimo simples.

O conjunto admissível para o critério de decréscimo simples é formado por todos os valores $\alpha \in [0, +\infty)$ que satisfazem a condição (3.1), isto é, tais que a imagem do ponto $x_k + \alpha d_k$ é estritamente menor a imagem do ponto x_k . Representamos este conjunto em vermelho na Figura 3.1.

Sejam os escalares $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$ e consideramos, em todo o texto, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ como o comprimento do passo inicial para a k -ésima iteração. Para encontrar um comprimento do passo que satisfaz algum critério de busca unidirecional, utilizamos o processo conhecido na literatura como *backtracking*, que consiste em reduzir o tamanho do comprimento do passo inicial até encontrar um comprimento do passo admissível. Este processo, geralmente, é utilizado quando a direção de busca é uma direção de busca e a busca unidirecional utilizada requer uma redução nos valores de função. Podemos encontrar um comprimento do passo que satisfaz o critério de decréscimo simples mediante o seguinte algoritmo.

Algoritmo 3.2 Backtracking *do critério DecS*

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $\sigma \in (0, 1)$ e $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$

Defina $\alpha = \bar{\alpha}_k$

REPITA enquanto $f(x_k + \alpha d_k) \geq f(x_k)$

$\alpha = \sigma \alpha$

Escolha $\alpha_k = \alpha$

Observamos que tomando direções d_k de descida para f a partir de x_k , decorre diretamente da Definição 2.40 que existe um intervalo suficiente pequeno para o qual todos os comprimentos de passo nesse intervalo satisfazem a condição de decréscimo simples (3.1), dessa maneira, o critério acima está bem definido.

Esta condição não é suficiente para garantir a convergência do método. O Exemplo 3.3, retirado da referência [30], demonstra esse fato.

Exemplo 3.3 Consideramos a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = x^2$ e suponhamos que um método que utiliza busca unidirecional gera a sequência dada por $x_k = 1 + \frac{1}{k+1}$, para todo $k \in \mathbb{N}$. Observamos que a sequência pode ser gerada por um método com o critério de decréscimo simples. De fato, para todo $k \in \mathbb{N}$ temos que

$$x_{k+1} = 1 + \frac{1}{k+2} < 1 + \frac{1}{k+1} = x_k$$

e que $x_k \geq 0$. Como a função x^2 é crescente em \mathbb{R}^+ temos que $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Mas o único ponto de acumulação da sequência $\{x_k\}$ é $x_* = 1$, que por sua vez não é ponto estacionário da função f . Portanto a condição de decréscimo simples não é suficiente para garantir a convergência do método.

3.3 Critério de Armijo

Nesta seção, tratamos do critério de Armijo, que denominaremos abreviadamente como critério **Arm**. Esta busca unidirecional é também chamada de decréscimo suficiente. É um dos critérios mais presente na literatura, e que motiva o desenvolvimento de muitos outros critérios que discutimos durante o trabalho. Apresentamos, também, sua representação geométrica e seu resultado de convergência. As referências básicas desta seção são [29, 30].

A regra de Armijo busca obter uma redução na função objetivo que seja proporcional ao comprimento do passo, exigindo mais que uma simples redução na função objetivo como o critério de decréscimo simples apresentado na seção anterior. Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção de descida d_k e um parâmetro $\gamma \in (0, 1)$, o critério de Armijo consiste em obter um comprimento do passo α_k tal que

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \alpha_k \gamma g_k^T d_k. \quad (3.2)$$

Geometricamente, o conjunto admissível para a condição de Armijo consiste de todos os comprimentos de passo α tais que o valor da imagem do ponto $x_k + \alpha d_k$ esteja abaixo da reta $l(\alpha) = f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k$, conforme mostrado na Figura 3.2.

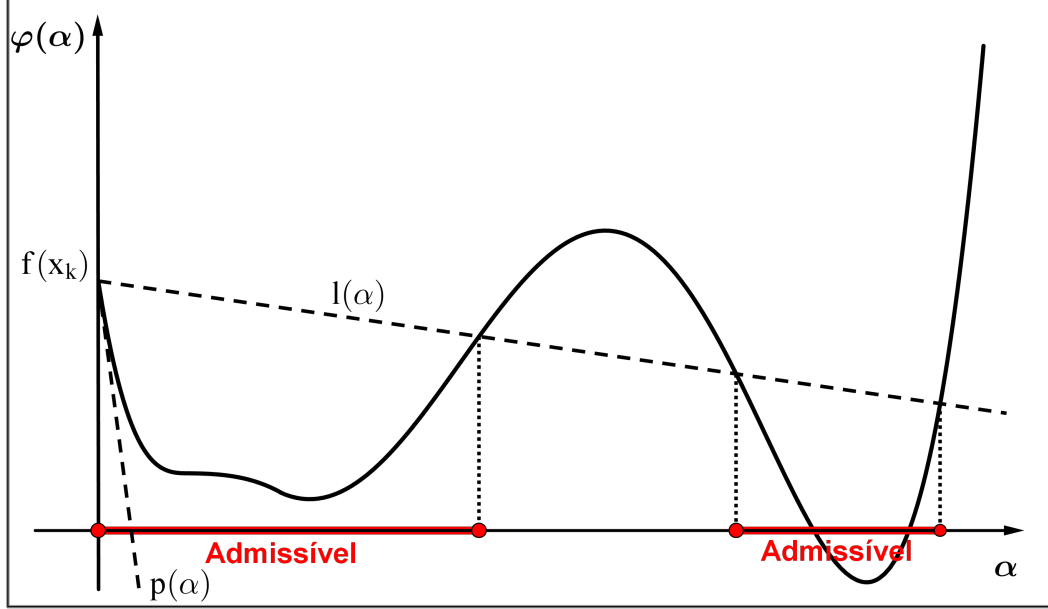


Figura 3.2: Conjunto admissível para o critério de Armijo.

Na Figura 3.2 consideramos p como sendo o polinômio de Taylor de primeira ordem em torno do ponto $\alpha = 0$ para a restrição φ de f a partir de x_k na direção de descida d_k . Como $\varphi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k)$, temos que

$$\varphi'(\alpha) = \nabla f(x_k + \alpha d_k)^T d_k,$$

donde $\varphi(0) = f(x_k)$ e $\varphi'(0) = g_k^T d_k$, portanto a aproximação de primeira ordem p é dada por

$$p(\alpha) = \varphi(0) + \varphi'(0)\alpha = f(x_k) + \alpha g_k^T d_k.$$

Afirmamos que a inclinação da reta l é a inclinação da aproximação p relaxada pela constante γ . De fato, notamos que a inclinação de p é dada por $g_k^T d_k$ e que a inclinação de l é dada por $\gamma g_k^T d_k$. Além disso, como d_k é uma direção de descida para f em x_k , temos $g_k^T d_k \leq 0$, e como $\gamma < 1$ temos $\gamma g_k^T d_k \geq g_k^T d_k$, e dado que $\alpha > 0$ obtemos

$$f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k \geq f(x_k) + \alpha g_k^T d_k,$$

e, portanto, $l(\alpha) \geq p(\alpha)$ para todo $\alpha > 0$, o que justifica a reta l estar acima da reta p na figura.

Agora apresentamos o processo de *backtracking* para obtenção de um comprimento do passo que satisfaz a condição de Armijo.

Algoritmo 3.4 Backtracking *do critério Arm*

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $\sigma, \gamma \in (0, 1)$ e $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$

Defina $\alpha = \bar{\alpha}_k$

REPITA enquanto $f(x_k + \alpha d_k) > f(x_k) + \gamma \alpha g_k^T d_k$

$$\alpha = \sigma \alpha$$

Escolha $\alpha_k = \alpha$

O próximo resultado, retirado da referência [30], mostra que o Algoritmo 3.4 está bem definido para direções de decida.

Teorema 3.5 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável. Consideramos um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção de descida $d_k \in \mathbb{R}^n$ e $\gamma \in (0, 1)$. Então existe $\delta > 0$ tal que*

$$f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k,$$

para todo $\alpha \in [0, \delta)$.

Demonstração: No caso em que $g_k^T d_k = 0$, então pela definição de direção de descida temos que existe o intervalo $(0, \delta]$, tal que

$$f(x_k + \alpha d_k) < f(x_k) = f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k.$$

No caso em que $g_k^T d_k < 0$, pela definição de derivada direcional temos que

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f(x_k + \alpha d_k) - f(x_k)}{\alpha} = g_k^T d_k.$$

Então, pela definição de limite, dado $\varepsilon = (\gamma - 1)g_k^T d_k > 0$, existe um $\delta > 0$ tal que

$$\frac{f(x_k + \alpha d_k) - f(x_k)}{\alpha} - g_k^T d_k < (\gamma - 1)g_k^T d_k$$

para todo $\alpha \in [0, \delta)$, o que implica

$$\frac{f(x_k + \alpha d_k) - f(x_k)}{\alpha} < \gamma g_k^T d_k$$

para todo $\alpha \in [0, \delta)$. Portanto, existe $\delta > 0$ tal que

$$f(x_k + \alpha d_k) < f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k$$

para todo $\alpha \in [0, \delta)$. ■

Enunciamos aqui o resultado de convergência do critério de Armijo, porém não vamos demonstrá-lo aqui, pois ele segue de um resultado mais geral, Teorema 4.8, que será demonstrado no Capítulo 4.

Teorema 3.6 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciável. Suponhamos que f é limitada inferiormente com gradiente ∇f Lipschitz contínuo em \mathbb{R}^n . Consideramos o método iterativo (1.2), onde d_k satisfaça (2.26) e (2.27) para constantes c_1 e c_2 , e que α_k , para todo $k \in \mathbb{N}$, é obtido pela busca unidirecional de Armijo. Então,*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \quad (3.3)$$

Demonstração: Veja Teorema 4.8 do Capítulo 4, tomando $M = 1$. ■

O teorema acima diz que um Algoritmo Básico que gera direções d_k que satisfazem as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) com o critério de Armijo produz uma sequência de iterandos tais que a sequência das normas dos respectivos gradientes da função objetivo converge a zero. Logo, todo ponto de acumulação é ponto estacionário de f .

Observamos que o Teorema 3.6 não é o único resultado de convergência para o critério de Armijo. Nas referências [30] e [24] podem ser encontradas provas de convergência para o critério de Armijo com hipóteses diferentes.

É interessante observar que o critério de Armijo pode ser satisfeito inclusive por pontos que estejam longe de um minimizador da restrição ϕ da função objetivo na direção d_k . Isso nos mostra que a busca exata, ou seja, a utilização apenas do minimizador global de ϕ a cada iteração, não é necessária para que a convergência seja garantida. O Teorema 3.5 garante a existência de um comprimento do passo, que pode ser muito pequeno, e caso isso ocorra na maioria das iterações, os métodos unidirecionais podem progredir de forma lenta. Outros critérios surgem com o intuito de evitar passos curtos e longe dos mínimos locais, como as buscas unidirecionais de Wolfe, Wolfe Forte e Goldstein, que discutimos na sequência.

3.4 Critério de Wolfe

Nesta seção apresentamos as condições de Wolfe, chamaremos abreviadamente por critério **Wolf**. Esta busca unidirecional surgiu principalmente para evitar comprimentos de passos muito pequenos. A referência desta seção é [29].

O critério de Wolfe consiste da condição de Armijo adicionada de uma nova condição, chamada condição de curvatura. *Sejam x_k um ponto, d_k uma direção de descida, e os parâmetros $0 < \gamma < \beta < 1$. O critério de Wolfe consiste em obter um comprimento do passo α_k que satisfaça simultaneamente às desigualdades*

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha_k d_k) &\leq f(x_k) + \alpha_k \gamma g_k^T d_k, \\ \nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k &\geq \beta g_k^T d_k. \end{aligned} \quad (3.4)$$

A primeira condição é a de Armijo e a segunda diz respeito à curvatura da restrição φ de f na direção d_k . De fato, procedendo analogamente à seção anterior, temos que $\beta g_k^T d_k$ é

um relaxamento da derivada direcional de f na direção d_k em x_k . Assim, a segunda condição requer comprimentos de passos α tais que a inclinação da reta definida pela derivada direcional de f em $x_k + \alpha d_k$ seja maior ou igual à inclinação $\beta g_k^T d_k$. Geometricamente, devemos buscar os comprimentos de passo para os quais a reta tangente de φ tem inclinação maior ou igual à inclinação da reta tangente no ponto inicial, quando $\alpha = 0$, relaxada pelo parâmetro β , como apontamos na Figura 3.3.

Notamos que esta condição elimina comprimentos de passos muito pequenos. Apresen-

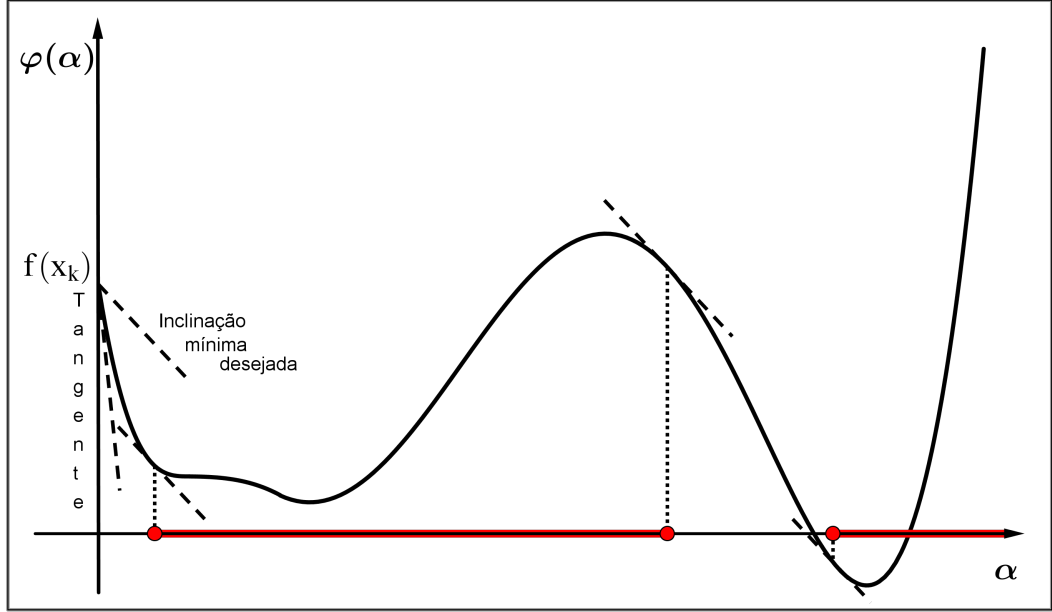


Figura 3.3: Passos que satisfazem a condição de curvatura.

tamos na Figura 3.4 o conjunto admissível para as condições de Wolfe, e salientamos novamente que o conjunto admissível consiste de comprimentos de passos que satisfazem simultaneamente a condição de Armijo e a condição de curvatura, e por este motivo o conjunto admissível das condições de Wolfe está contido no conjunto admissível da condição de Armijo.

O Teorema 3.7, proposto em [29], garante a existência de um conjunto de comprimentos de passos que satisfazem simultaneamente as condições de Wolfe (3.2) e (3.4).

Teorema 3.7 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável. Suponhamos que d_k é uma direção de descida em x_k e que f é limitada inferiormente ao longo do conjunto $\{x_k + \alpha d_k; \alpha > 0\}$. Se $0 < \gamma < \beta < 1$, então existe um intervalo de comprimentos de passo que satisfazem simultaneamente as condições (3.2) e (3.4).*

Demonstração: Da hipótese de f ser limitada inferiormente, a restrição $\varphi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k)$ é limitada inferiormente para todo $\alpha > 0$. Como $0 < \gamma < 1$, pelo Teorema 3.5 existe um intervalo admissível $[0, \alpha')$ para a condição de Armijo. Notamos que α' é um ponto onde há intersecção

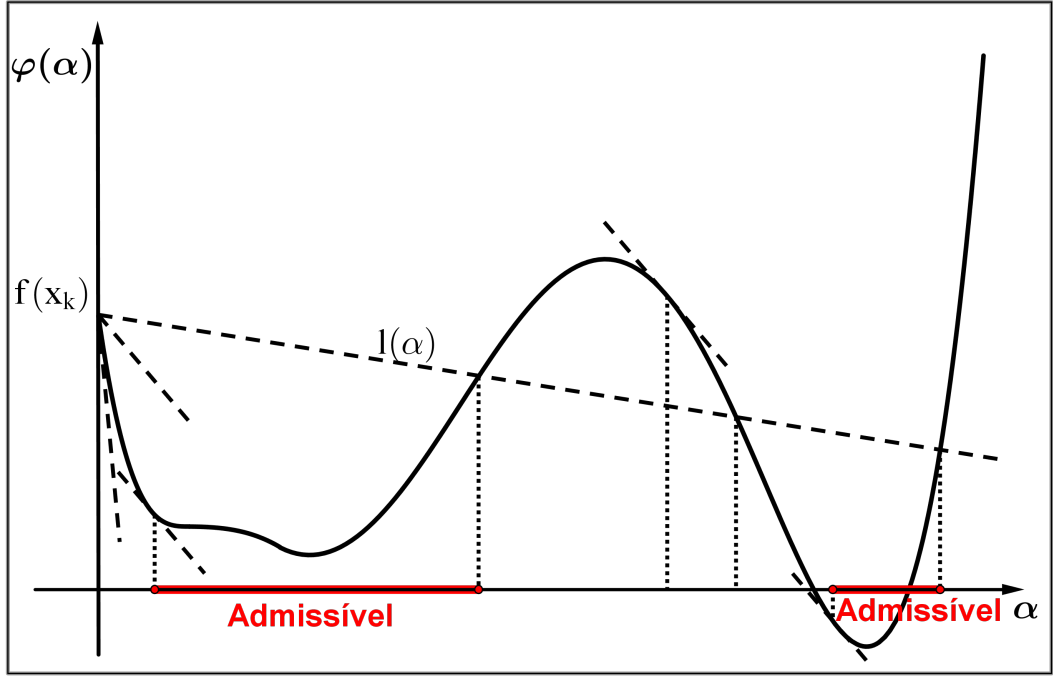


Figura 3.4: Conjunto admissível pelo critério de Wolfe.

da reta l , definida por $l(\alpha) = f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k$, com a restrição φ , isto é,

$$f(x_k + \alpha' d_k) = f(x_k) + \alpha' \gamma g_k^T d_k. \quad (3.5)$$

Pelo Teorema do Valor Médio 2.21, existe $\alpha'' \in (0, \alpha')$ de tal modo que

$$f(x_k + \alpha' d_k) - f(x_k) = \alpha' \nabla f(x_k + \alpha'' d_k)^T d_k. \quad (3.6)$$

Combinando as igualdades (3.5) e (3.6), obtemos

$$\alpha' \nabla f(x_k + \alpha'' d_k)^T d_k = \alpha' \gamma g_k^T d_k > \alpha' \beta g_k^T d_k, \quad (3.7)$$

pois $\gamma < \beta$ e $g_k^T d_k < 0$. Simplificando ambos os membros, obtemos

$$\nabla f(x_k + \alpha'' d_k)^T d_k > \beta g_k^T d_k. \quad (3.8)$$

Portanto, como α'' pertence ao intervalo com comprimentos de passos que satisfazem Armijo, por (3.8) temos que α'' satisfaz as condições de Wolfe. Além disso, como consequência da diferenciabilidade da função f , existe um intervalo tal que as condições de Wolfe (3.2) e (3.8) são satisfeitas. ■

Reproduzimos abaixo o algoritmo apresentado em [10] para a obtenção de um comprimento do passo que verifica as condições de Wolfe.

Algoritmo 3.8 *Busca para o critério Wolfe*

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $R > 1$, $0 < r \leq \frac{1}{2}$, $0 < \gamma < \beta < 1$, $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$

Defina $\alpha = \bar{\alpha}_k$, $\alpha_l = 0$, $\alpha_u = \infty$

REPITA enquanto $\alpha_l \neq \alpha_u$

$$SE f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k$$

$$\alpha_l = \alpha$$

CASO CONTRÁRIO

$$\alpha_u = \alpha$$

$$SE f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k \text{ e } \nabla f(x_k + \alpha d_k)^T d_k \geq \beta g_k^T d_k$$

$$\alpha_u = \alpha$$

CASO CONTRÁRIO

escolha um novo α com $\alpha_l < \alpha < \alpha_u$

$$SE \alpha_u = \infty$$

$$\alpha = \max\{\alpha, R\alpha_l\}$$

CASO CONTRÁRIO

$$\alpha = \max\{(1-r)\alpha_l + r\alpha_u, \min\{\alpha, r\alpha_l + (1-r)\alpha_u\}\}$$

Notamos que quando as condições de Wolfe não forem satisfeitas, ora uma ou ora outra, escolhemos novos comprimentos de passos teste, modificando um dos pontos α_l e α_u para ser o comprimento do passo teste atual, e além disso, os ajustamos para encontrar um comprimento do passo α_u finito. Estas escolhas são tais que a distância entre α_u e α_l decresce em cada iteração. O algoritmo só para quando os comprimentos de passo α_l e α_u forem iguais e satisfazem as condições de Wolfe. O próximo teorema garante que o algoritmo para após um número finito de iterações.

Teorema 3.9 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciável. Se f é limitada inferiormente em \mathbb{R}^n , então o Algoritmo 3.8 está bem definido.*

Demonstração: Veja [7]. ■

Apresentamos o resultado de convergência para o critério Wolfe. A referência do próximo teorema e o próximo corolário que o segue é [29]. Reescrevemos estes resultados com mais detalhes.

Teorema 3.10 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável em um conjunto aberto U que contém o conjunto de nível $\Omega_0 = \{x; f(x) \leq f(x_0)\}$. Suponhamos que f é limitada inferiormente em \mathbb{R}^n com gradiente ∇f Lipschitz contínuo em U conforme a Definição 2.15 com constante L . Consideramos qualquer iteração da forma (1.2), onde d_k é uma direção de descida e α_k satisfaz as condições Wolfe (3.2) e (3.4). Então, a condição Zoutendijk*

$$\sum_{k \geq 0} \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 < \infty, \quad (3.9)$$

onde θ_k é ângulo entre d_k e $-g_k$, é satisfeita.

Demonstração: Adicionando o termo $-g_k^T d_k$ em ambos os membros da condição (3.4) obtemos

$$(g_{k+1} - g_k)^T d_k \geq (\beta - 1) g_k^T d_k. \quad (3.10)$$

Usando a desigualdade de Cauchy-Schwartz, o fato de que o gradiente ∇f é Lipschitz contínuo com constante L e (1.2), temos

$$\begin{aligned} (g_{k+1} - g_k)^T d_k &\leq \|g_{k+1} - g_k\| \|d_k\| \\ &\leq L \|x_{k+1} - x_k\| \|d_k\| \\ &\leq \alpha_k L \|d_k\|^2. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Combinando as relações (3.10) e (3.11), obtemos

$$\alpha_k \geq \frac{(\beta - 1)}{L} \frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|^2}.$$

Substituindo esta desigualdade na primeira condição Wolfe (3.2), obtemos

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leq f(x_k) + \gamma \frac{(\beta - 1)}{L} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \\ &= f(x_k) - \gamma \frac{(1 - \beta)}{L} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2}. \end{aligned}$$

A partir de (2.29), podemos escrever esta relação como

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - c \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2,$$

onde $c = \gamma \frac{1-\beta}{L}$. Donde

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \leq -c \cos^2 \theta_k \|g_k\|^2.$$

Somando esta expressão sobre todos os índices menores ou igual a k , obtemos

$$f(x_{k+1}) - f(x_0) \leq -c \sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|g_j\|^2.$$

Isto é,

$$\sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|g_j\|^2 \leq \frac{f(x_0) - f(x_{k+1})}{c}.$$

Como f é limitada inferiormente, digamos $f(x) > -R$ para alguma constante $R > 0$, então $f(x_0) - f(x_{k+1}) < f(x_0) + R$ para todo k , e pelo fato de $f(x_0) > f(x_{k+1})$ para $k \geq 0$, temos,

definindo $D > 0$ por $f(x_0) - R := c D$, que, para todo $k \in \mathbb{N}$, que

$$\sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|g_j\|^2 \leq \frac{f(x_0) - f(x_{k+1})}{c} \leq D,$$

donde,

$$\sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|g_j\|^2 \leq D, \quad \forall k \in \mathbb{N}. \quad (3.12)$$

Então, tomando limite em (3.12), obtemos

$$\sum_{j=0}^{\infty} \cos^2 \theta_j \|g_j\|^2 < \infty,$$

que conclui a prova. ■

Observamos que a condição (3.9) implica, pela condição necessária de convergência de séries que

$$\cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 \rightarrow 0.$$

Corolário 3.11 *Suponhamos que a sequência $\{\cos \theta_k\}$ é limitada inferiormente por uma constante $c > 0$ e que as hipóteses do Teorema 3.10 são satisfeitas, então temos que $\|g_k\| \rightarrow 0$.*

Demonstração: De fato, se $\|g_k\| \not\rightarrow 0$, então existiria $\varepsilon > 0$ e alguma subsequência $\{\|g_k\|\}_{k \in \mathbb{N}'}$ de $\{\|g_k\|\}$ tais que $\|g_k\| > \varepsilon$ para todo $k \in \mathbb{N}'$ e logo

$$\cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 \geq (\varepsilon c)^2 > 0$$

para todo $k \in \mathbb{N}'$, o que contradiz $\cos^2 \theta_k \|g_k\|^2 \rightarrow 0$ para $k \in \mathbb{N}'$. ■

Observação 3.12 *Pelo Teorema 2.48, se um algoritmo gerar direções tais que as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) são satisfeitas, temos que o critério de Wolfe garante a convergência global para o algoritmo.*

3.5 Critério de Wolfe Forte

As condições de Wolfe Forte surgiram com o intuito de melhorar as condições de Wolfe que vimos na seção anterior. Nos referimos a este critério abreviadamente por critério **WolfF**. Como podemos observar na Figura 3.4, o conjunto admissível pelas condições de Wolfe contém comprimentos de passos que estão longe dos minimizadores locais da restrição φ de f na direção d_k a partir de x_k . As condições fortes de Wolfe são motivadas em excluir esses comprimentos

de passos do conjunto admissível.

Dados um ponto x_k , uma direção de descida d_k , e os parâmetros $0 < \gamma < \beta < 1$, o critério de Wolfe Forte consiste em obter um comprimento do passo α_k que satisfaça simultaneamente às desigualdades

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha_k d_k) &\leq f(x_k) + \alpha_k \gamma g_k^T d_k, \\ |\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| &\leq \beta |g_k^T d_k|. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Enquanto no critério Wolf o comprimento do passo α_k deve verificar a condição de curvatura $\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \beta g_k^T d_k$, o critério Wolfe também exige que α_k satisfaça $\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \leq -\beta g_k^T d_k$. Desta forma, restringimos pela nova condição de curvatura os comprimentos de passo cuja inclinação da reta tangente à restrição φ seja muito íngreme, como mostramos na Figura 3.5.

Notamos que a condição (3.13) elimina apenas os comprimentos de passo que estão

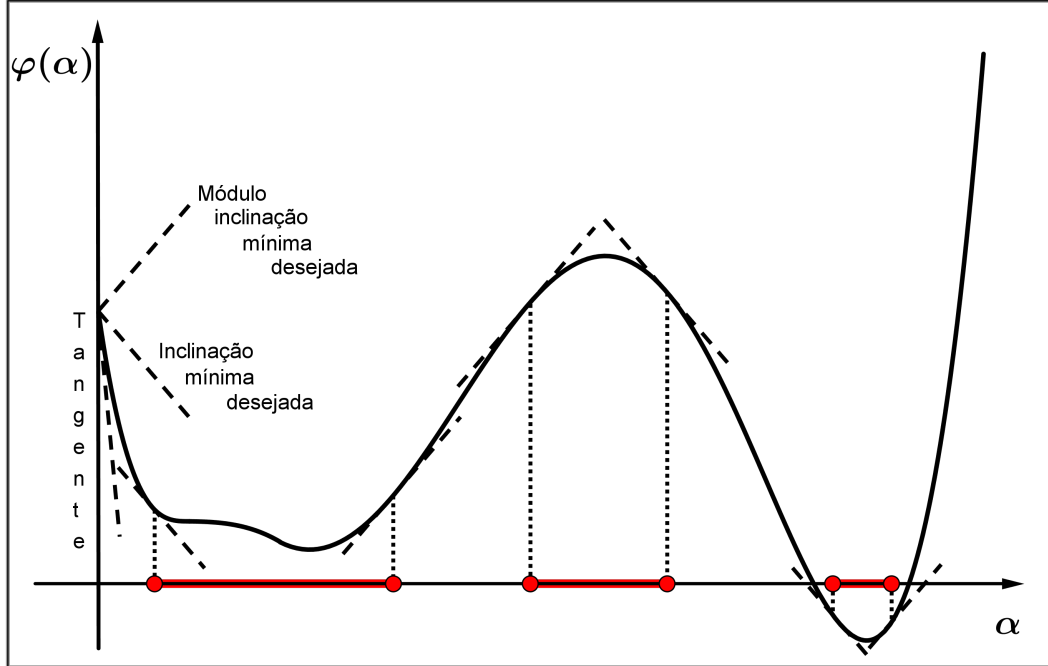


Figura 3.5: Passos que satisfazem a condição de curvatura de Wolfe forte.

longe dos pontos de máximos e mínimos locais para a restrição φ . Com a condição de Armijo dada em (3.2), o critério tende a eliminar os comprimentos de passos que estão próximos aos máximos locais, embora isto nem sempre aconteça. A representação das condições fortes de Wolfe é dada na Figura 3.6. Notamos que estas são mais restritivas que as condições de Wolfe, visto que seu conjunto admissível está contido no conjunto admissível das condições de Wolfe.

O próximo resultado, retirado da referência [29], garante a existência de um intervalo com comprimentos de passos que satisfaz as condições de Wolfe Forte.

Teorema 3.13 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciável. Suponhamos que f é limitada*

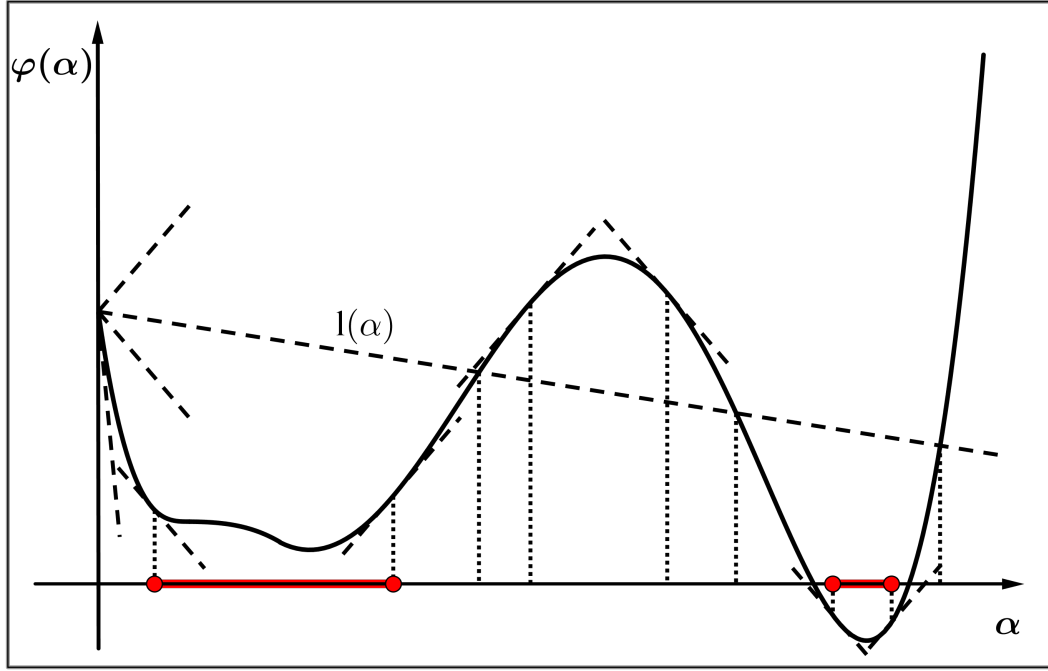


Figura 3.6: Conjunto admissível pelas condições de Wolfe forte.

inferiormente ao longo do conjunto $\{x_k + \alpha d_k; \alpha > 0\}$, e que d_k é uma direção de descida para f em x_k . Se $0 < \gamma < \beta < 1$, então existe um intervalo de comprimentos de passo que satisfazem simultaneamente as condições (3.2) e (3.13).

Demonstração: Procedendo de forma análoga ao Teorema 3.7, obtemos que existe $\alpha'' \in (0, \alpha')$, com $\alpha' > 0$ sendo o ponto de interseção da restrição φ de f na direção d_k a partir de x_k com a reta $l(\alpha) = f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k$, tal que a desigualdade (3.7) é válida. Donde segue que

$$\beta g_k^T d_k < \nabla f(x_k + \alpha'' d_k)^T d_k = \gamma g_k^T d_k < 0$$

e conseqüentemente,

$$-\beta g_k^T d_k > -\nabla f(x_k + \alpha'' d_k)^T d_k$$

logo, tomando módulo, temos

$$|\nabla f(x_k + \alpha'' d_k)^T d_k| < |\beta g_k^T d_k|.$$

Portanto, existe um comprimento do passo α'' que satisfaz as condições de Wolfe Forte. O resultado, da existência de um intervalo que contém comprimentos de passos que satisfazem as condições (3.2) e (3.13) segue da diferenciabilidade da função f . ■

Apresentamos agora o processo para encontrar um comprimento do passo que satisfaça as condições de Wolfe Forte. A referência dos próximos dois algoritmos é [29].

Algoritmo 3.14 Busca para o critério Wolff

Sejam $0 < \alpha_{\min} < \alpha_{\max}$ e escolha $\alpha_1 \in (\alpha_{\min}, \alpha_{\max})$

$i = 1$

REPITA enquanto não parar

Calcule $f(x_k + \alpha_i d_k)$

SE $f(x_k + \alpha_i d_k) > f(x_k) + \gamma \alpha_i g_k^T d_k$ ou $[f(x_k + \alpha_i d_k) \geq f(x_k + \alpha_{i-1} d_k) \text{ e } i > 1]$ (3.14)

Obtenha α_k pelo processo $\text{zoom}(\alpha_i, \alpha_{i+1})$ e pare

Calcule $\nabla f(x_k + \alpha_i d_k)^T d_k$

SE $|\nabla f(x_k + \alpha_i d_k)^T d_k| \leq -\beta g_k^T d_k$

Defina $\alpha_k = \alpha_i$ e pare

SE $\nabla f(x_k + \alpha_i d_k)^T d_k \leq 0$

Obtenha α_k pelo processo $\text{zoom}(\alpha_i, \alpha_{i-1})$ e pare

Escolha $\alpha_{i+1} \in (\alpha_i, \alpha_{\max})$

Faça $i = i + 1$

O processo $\text{zoom}(\alpha_l, \alpha_u)$ referido no algoritmo acima é dado a seguir.

Algoritmo 3.15 $\text{zoom}(\alpha_l, \alpha_u)$

REPITA enquanto não parar

Escolha um passo α_j entre α_l e α_u

Calcule $f(x_k + \alpha_j d_k)$

SE $f(x_k + \alpha_j d_k) > f(x_k) + \gamma \alpha_j g_k^T d_k$ ou $f(x_k + \alpha_j d_k) \geq f(x_k + \alpha_l d_k)$ (3.15)

$\alpha_u = \alpha_j$

CASO CONTRÁRIO

Calcule $\nabla f(x_k + \alpha_j d_k)^T d_k$

SE $|\nabla f(x_k + \alpha_j d_k)^T d_k| \leq -\beta g_k^T d_k$

Defina $\alpha_k = \alpha_j$ e pare

SE $\nabla f(x_k + \alpha_j d_k)^T (\alpha_u - \alpha_l) \leq 0$

$\alpha_u = \alpha_l$

$\alpha_l = \alpha_j$

Notamos que a busca de um comprimento do passo que satisfaz as condições de Wolfe forte é realizada em duas etapas, a primeira etapa constrói iterativamente uma sequência de valores teste α_i tal que $\{f(x_k + \alpha_i d_k)\}_i$ seja monótona, até que, ou um comprimento aceitável seja encontrado, e neste caso o algoritmo para, ou um intervalo que contenha passos desejáveis seja detectado, neste caso a função $\text{zoom}(\alpha_l, \alpha_u)$ é chamada. A função $\text{zoom}(\alpha_l, \alpha_u)$ ao longo das iterações diminui o intervalo (α_l, α_u) até que um comprimento do passo desejável seja encontrado. O Algoritmo 3.14 entra na função $\text{zoom}(\alpha_l, \alpha_u)$ em três situações: quando α_i não satisfaz (3.2), quando há um aumento nos valores de função quando aplicados aos comprimentos de passo, isto é, $f(x_k + \alpha_i d_k) \leq f(x_k + \alpha_{i-1} d_k)$, ou quando a restrição da função é crescente a partir do comprimento do passo α_i , isto é, $\nabla f(x_k + \alpha_i d_k)^T d_k \geq 0$. Observamos que o intervalo (α_l, α_u) da função $\text{zoom}(\alpha_l, \alpha_u)$ não precisa ser ordenado, isto é, podemos ter tanto

$\alpha_l < \alpha_u$ quanto $\alpha_u < \alpha_l$. Além disso, mantemos o passo α_l satisfazendo a condição de (3.2) e pretendemos escolher α_u tal que $\nabla f(x_k + \alpha_l d_k)(\alpha_u - \alpha_l) < 0$. Sempre procuramos um ponto α_j entre α_l e α_u que satisfaz as condições de Wolfe. No caso em que não encontramos um α_j satisfazendo (3.2) e (3.13), modificamos um dos dois extremos α_l ou α_u de modo que as condições para o processo *zoom* continuem valendo, e repetimos o processo até encontrar um comprimento do passo que satisfaz as condições fortes de Wolfe. O próximo teorema garante que o Algoritmo 3.14 termina após um número finito de passos.

Teorema 3.16 *Se $0 < \gamma < \beta < 1$ então o Algoritmo 3.14 termina após um número finito de iterações.*

Demonstração: Veja [1] ■

A seguinte observação refere-se ao resultado de convergência deste critério.

Observação 3.17 *Segundo os autores de [29] podemos demonstrar resultados semelhantes aos do Teorema 3.10 e do Corolário 3.11 para as condições de Wolfe Forte. Decorre disto que, se um algoritmo gerar direções tais que as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) são satisfeitas, então, pelo Teorema 2.48, temos que este algoritmo com o critério de Wolfe Forte tem garantia de convergência.*

Finalizamos a discussão sobre este critério comentando que na referência [26] são apresentados, além de análise de convergência, novos processos de buscas unidirecionais, com hipóteses usuais, generalizando as condições de Wolfe forte com os parâmetros da busca podendo assumir valores $0 < \gamma \leq \beta < 1$.

3.6 Critério de Goldstein

Nesta seção, discutimos as condições de Goldstein, que abreviadamente chamaremos de critério **Gold**. Estas condições também buscam eliminar a aceitação de comprimentos de passos muito curtos na busca unidirecional, porém, ao contrário das condições de Wolfe, não requerem avaliações adicionais de gradiente.

Dados um ponto x_k , uma direção de descida d_k e os parâmetros $0 < \gamma < \rho < 1$, o critério de Goldstein consiste em obter um comprimento do passo α_k que satisfaça simultaneamente as desigualdades

$$f(x_k) + \rho \alpha_k g_k^T d_k \leq f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k. \quad (3.16)$$

Desta forma, o critério de Goldstein busca comprimentos de passos α cuja imagem do ponto $x_k + \alpha d_k$ esteja compreendida entre duas aproximações lineares, relaxadas por parâmetros, para a restrição φ de f na direção d_k no ponto x_k . O conjunto admissível contendo os comprimentos de passos aceito pelas condições de Goldstein é apresentado na Figura 3.7. Consideramos neste gráfico $l_1(\alpha) = f(x_k) + \gamma \alpha g_k^T d_k$ e $l_2(\alpha) = f(x_k) + \rho \alpha g_k^T d_k$, com $\gamma < \rho$.

Notamos que o conjunto admissível pelas condições de Goldstein contém o conjunto ad-

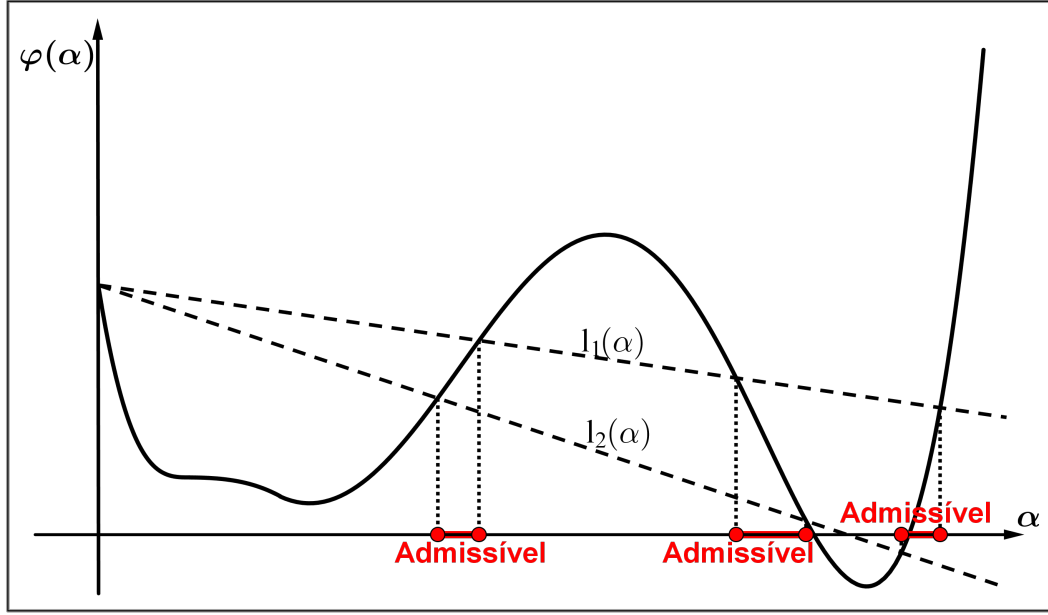


Figura 3.7: Conjunto admissível pelas condições de Goldstein.

missível da condição de Armijo, mas não tem relação com os conjuntos admissíveis dos critérios de Wolfe. O próximo resultado garante a existência de um conjunto que satisfaz as condições de Goldstein.

Teorema 3.18 *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável e limitada inferiormente ao longo do conjunto $\{x_k + \alpha d_k; \alpha > 0\}$ e d_k uma direção de descida em x_k . Se $0 < \gamma < \rho < 1$ então existe um intervalo de comprimentos de passo que satisfazem simultaneamente as condições (3.16).*

Ideia da Prova: Como por hipótese f é limitada inferiormente, então a restrição de f na direção d_k a partir de x_k dada por $\varphi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k)$ é limitada inferiormente para todo $\alpha > 0$. Como $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} l_1(\alpha) = -\infty = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} l_2(\alpha)$ e a restrição φ é contínua, então φ intersecta l_1 e l_2 . Observamos que φ intersecta l_1 e l_2 em no máximo um número finito de vezes e que φ intersecta l_2 antes de intersectar l_1 . Sejam α_1 o comprimento do passo que proporciona a primeira intersecção de φ com l_1 e α_2 o maior comprimento do passo menor que α_1 proporcionando uma intersecção de φ com l_2 . Então o intervalo (α_2, α_1) é formado por comprimentos de passos que satisfazem as condições de Goldstein. ■

De posse da existência de um conjunto admissível que satisfaz as condições de Goldstein, discutimos como encontrar um comprimento do passo admissível. Este processo de busca está baseado no Algoritmo 3.19, retirado de [10].

Algoritmo 3.19 *Busca para o critério Gold*

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$, $0 < \gamma < \rho < 1$, $0 < r < 1$

Defina $\alpha = \bar{\alpha}_k$ e $\alpha' = \alpha$

ENQUANTO $f(x_k + \alpha d_k) > f(x_k) + \alpha \gamma g_k^T d_k$ (3.17)

Faça $\alpha' = \alpha$ e $\alpha = r\alpha'$

ENQUANTO $f(x_k + \alpha' d_k) < f(x_k) + \alpha' \rho g_k^T d_k$

Faça $\alpha = \alpha'$ e $\alpha' = \frac{\alpha}{r}$

ENCONTRE um comprimento do passo $\alpha_k \in (\alpha, \alpha')$ pelo processo $\text{zoom_goldstein}(\alpha, \alpha')$

O processo de $\text{zoom_goldstein}(\alpha, \alpha')$ é descrito no seguinte algoritmo:

Algoritmo 3.20 $\text{zoom_goldstein}(\alpha_l, \alpha_u)$

Dados $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$ e $0 < \gamma < \rho < 1$

Defina $\alpha \in (\alpha_l, \alpha_u)$

REPITA enquanto não parar

SE $f(x_k + \alpha d_k) < f(x_k) + \rho \alpha g_k^T d_k$

$\alpha_l = \alpha$

OU SE $f(x_k + \alpha d_k) > f(x_k) + \gamma \alpha g_k^T d_k$ (3.18)

$\alpha_u = \alpha$

CASO CONTRÁRIO

$\alpha_k = \alpha$ e pare

Notamos que o algoritmo da busca de Goldstein se divide em dois “enqu岸tos” que são excludentes, pois $\rho g_k^T d_k \leq \gamma g_k^T d_k$. Donde, o comprimento do passo inicial $\bar{\alpha}_k$ no Algoritmo 3.19, ou entra no primeiro “enquanto”, ou no segundo “enquanto”, ou satisfaz as condições de Goldstein. O primeiro “enquanto” define um intervalo à esquerda do comprimento do passo inicial. Deslocando o intervalo à esquerda até encontrar um intervalo (α, α') tal que α satisfaz a primeira condição (3.2), satisfazendo ou não a segunda condição, e α' não satisfaz a condição (3.2). Porém independente de α satisfazer ou não a condição (3.16), o intervalo (α, α') contém comprimentos de passo que são admissíveis pelo critério Gold. O segundo “enquanto” define, de forma análoga um intervalo (α, α') à direita do comprimento do passo inicial de modo que α não satisfaz a segunda condição de Goldstein, e que ao contrário de α , o comprimento do passo α' satisfaz a segunda condição de Goldstein podendo ou não satisfazer simultaneamente as condições (3.16). Da mesma forma que antes, o intervalo (α, α') contém um intervalo que satisfaz as condições de Goldstein. O processo zoom_goldstein refina o intervalo eliminando os intervalos que não contém comprimentos de passos que satisfazem as condições (3.16). Este processo para ao encontrar um comprimento do passo admissível.

Observação 3.21 *Podemos mostrar resultados similares ao Teorema 3.10 e ao Corolário 3.11 com as condições de Goldstein ao invés das condições de Wolfe. Pelo Teorema 2.48, se um algoritmo gerar direções tais que as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) são satisfeitas, temos que o algoritmo com o critério de Goldstein tem garantia de convergência.*

Apresentamos no final desse capítulo dois critérios de buscas monótonas que não estão entre os normalmente citados na literatura. Estes critérios são relativamente novos e foram encontrados mediante uma varredura realizada em artigos da área. Decidimos estudá-los pelas suas interessantes propriedades e objetivando comparações numéricas com as buscas clássicas.

3.7 Critério de Shi e Shen

O critério de Shi e Shen [34] generaliza de certa forma a busca unidirecional de Armijo. Abreviadamente, nos referimos a esta busca unidirecional de critério **SS**. Segundo os autores, o critério aqui discutido permite escolher comprimentos de passos maiores em cada iteração e ainda reduzir o número de avaliações de função quando comparado com Armijo.

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção $d_k \in \mathbb{R}^n$ tal que $g_k^T d_k < 0$, $\gamma \in (0, \frac{1}{2})$, $L_k > 0$ e $\mu \in [0, 2)$, o critério de Shi e Shen consiste em obter um comprimento do passo α_k que satisfaça

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \gamma \alpha_k \left[g_k^T d_k + \frac{1}{2} \alpha_k \mu L_k \|d_k\|^2 \right]. \quad (3.19)$$

Além disso, o *backtracking* associado a esta busca é realizado da seguinte forma:

Algoritmo 3.22 Backtracking do critério **SS**

Dados x_k , $d_k \in \mathbb{R}^n$ tais que $g_k^T d_k < 0$, $\sigma \in (0, 1)$, $L_k > 0$ e $\mu \in [0, 2)$

Defina $\alpha = -\frac{g_k^T d_k}{L_k \|d_k\|^2}$

REPITA enquanto $f(x_k + \alpha d_k) > f(x_k) + \gamma \alpha \left[g_k^T d_k + \frac{1}{2} \alpha \mu L_k \|d_k\|^2 \right]$

Faça $\alpha = \sigma \alpha$

Escolha $\alpha_k = \alpha$

Notamos que, se d_k é uma direção tal que $g_k^T d_k < 0$, o fator $g_k^T d_k + \frac{1}{2} \alpha \mu L_k \|d_k\|^2$ é negativo. De fato, como $\mu < 2$ temos que $1 - \frac{\sigma^\ell}{2} \mu > 1 - \sigma^\ell > 0$ para todo $\ell \in \mathbb{N}$. Como $\alpha = -\frac{\sigma^\ell g_k^T d_k}{L_k \|d_k\|^2}$ temos, substituindo no fator acima, que

$$\begin{aligned} g_k^T d_k + \frac{1}{2} \alpha \mu L_k \|d_k\|^2 &= g_k^T d_k - \frac{\sigma^\ell g_k^T d_k}{2 L_k \|d_k\|^2} \mu L_k \|d_k\|^2 \\ &= \left(1 - \frac{\sigma^\ell}{2} \mu \right) g_k^T d_k < 0 \end{aligned}$$

já que $g_k^T d_k < 0$. Portanto, de (3.19) temos que $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$ para todo $k \in \mathbb{N}$, o que caracteriza este critério como um busca unidirecional monótona. A próxima observação garante que existe $\delta > 0$ tal que todo $\alpha \in [0, \delta)$ satisfaz a condição (3.19).

Observação 3.23 *Sejam A^A o conjunto dos comprimentos de passos admitidos pelo critério de Armijo e A^{SS} o conjunto dos comprimentos de passos admitidos pelo critério **SS**. Então $A^A \subset A^{SS}$.*

De fato, seja $\alpha_k \in A^A$. Como a parcela $\frac{1}{2}\gamma\alpha_k^2\mu L_k\|d_k\|^2 \geq 0$, somando $f(x_k) + \gamma\alpha_k g_k^T d_k$ em ambos membros temos que,

$$f(x_k) + \gamma\alpha_k \left[g_k^T d_k + \frac{1}{2}\alpha_k\mu L_k\|d_k\|^2 \right] \geq f(x_k) + \gamma\alpha_k g_k^T d_k \geq f(x_k + \alpha_k d_k),$$

uma vez que α_k satisfaz (3.2). Donde, α_k satisfaz (3.19) e logo, $\alpha_k \in A^{SS}$. Portanto $A^A \subset A^{SS}$.

Notamos que, se $\mu = 0$ então a regra (3.19) se reduz à busca de Armijo (3.2).

Os autores deste critério apresentam algumas estimativas para as constantes L_k . Sugere-se que L_k se aproxime da constante Lipschitz L do gradiente ∇f da função objetivo f , pois com esse valor o critério tem melhor performance numérica. Nos casos em que L é dado, devemos certamente tomar $L_k = L$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Entretanto, geralmente L não é conhecido, nesses casos estimamos valores para L_k .

Para isto, definimos

$$p_{k-1} = x_k - x_{k-1}, \quad q_{k-1} = g_k - g_{k-1}, \quad k = 2, 3, 4, \dots$$

Os autores sugerem utilizar

$$L_k = \frac{\|q_{k-1}\|}{\|p_{k-1}\|} \quad (3.20)$$

ou

$$L_k = \max_{0 \leq i \leq \min\{k, M\}} \left\{ \frac{\|q_{k-i}\|}{\|p_{k-i}\|} \right\},$$

onde M é um inteiro positivo.

Os autores também estimam esses parâmetros, motivados pelo método de Barzilai e Borwein [3], resolvendo a minimização

$$\min_{L_k} \|L_k p_{k-1} - q_{k-1}\|,$$

obtém-se

$$L_k = \frac{p_{k-1}^T q_{k-1}}{\|p_{k-1}\|^2}. \quad (3.21)$$

Além disso, podemos também tomar

$$L_k = \max_{0 \leq i \leq \min\{k, M\}} \left\{ \frac{p_{k-1}^T q_{k-1}}{\|p_{k-1}\|^2} \right\}.$$

Por fim, os autores, ainda, sugerem

$$L_k = \frac{\|q_{k-1}\|^2}{p_{k-1}^T q_{k-1}} \quad (3.22)$$

ou

$$L_k = \max_{0 \leq i \leq \min\{k, M\}} \left\{ \frac{\|q_{k-1}\|^2}{p_{k-1}^T q_{k-1}} \right\}.$$

O resultado de convergência associado à busca unidirecional monótona de Shi e Shen é apresentado a seguir.

Teorema 3.24 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável. Suponhamos que f tem um limite inferior no conjunto de nível $\Omega_0 = \{x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq f(x_0)\}$, e que o gradiente ∇f é Lipschitz contínuo com constante L em um conjunto aberto e convexo B que contém Ω_0 . Consideramos uma direção de busca d_k que satisfaz $g_k^T d_k < 0$ e o comprimento de α_k obtido pelo critério de Shi e Shen. Então o Algoritmo Básico 2.38 gera uma sequência infinita $\{x_k\}$ e*

$$0 < L_k \leq m_k L,$$

onde m_k é um inteiro positivo e $m_k \leq M_0 < +\infty$, com M_0 uma constante positiva. Além disso,

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|} \right)^2 < \infty. \quad (3.23)$$

Demonstração: Veja o artigo [34]. ■

Corolário 3.25 *Suponhamos as hipóteses do Teorema 3.24 válidas. Além disso, assumimos que o Algoritmo Básico utiliza direções satisfazendo as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27). Então*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

Demonstração: De fato, pela hipótese (2.26), temos que $(g_k^T d_k)^2 \geq c_1^2 \|g_k\|^4$, e da hipótese (2.27) temos que $\frac{1}{\|d_k\|} \geq \frac{1}{c_2^2 \|g_k\|^2}$, e portanto,

$$\frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \geq \frac{(g_k^T d_k)^2}{c_2^2 \|g_k\|^2} \geq \frac{c_1^2 \|g_k\|^4}{c_2^2 \|g_k\|^2} = \frac{c_1^2 \|g_k\|^2}{c_2^2} \geq 0.$$

Desta forma, tomando limite em ambos os membros da desigualdade acima, e utilizando a condição necessária para de convergência da série (3.23), temos que $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{c_1^2 \|g_k\|^2}{c_2^2} = 0$ o que implica na condição (3.3). ■

3.8 Critério de Zhen, Zhou e Li

Esta seção apresenta o critério de busca unidirecional desenvolvido por Zhen, Zhou e Li, e denominado, abreviadamente, por critério ZZL. Este critério, proposto em [39], é utilizado para o método de Gradientes Conjugados de Fletcher-Reeves [17]. Apesar deste critério ser designado para o método de Gradientes Conjugados, apresentamo-lo nesta seção, com o intuito de estudar buscas unidirecionais diferenciadas e de utilizá-lo nos testes numéricos do Capítulo 5.

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção $d_k \in \mathbb{R}^n$ tal que $g_k^T d_k < 0$, e os parâmetros

$\gamma \in (0, 1)$ e $\nu > 0$, o critério de Zhen, Zhou e Li, consiste em encontrar um comprimento do passo α_k tal que

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k - \nu \alpha_k^2 \|d_k\|^2. \quad (3.24)$$

Uma vez que d_k é uma direção tal que $g_k^T d_k < 0$ temos que $\gamma \alpha_k g_k^T d_k - \nu \alpha_k^2 \|d_k\|^2 < 0$, donde $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$ o que comprova que o critério é uma busca monótona.

Observação 3.26 Notamos que esse critério está bem definido para qualquer método de Otimização Irrestrita que forneça direções tais que $g_k^T d_k < 0$.

De fato, se $g_k^T d_k < 0$, temos pelo Teorema 3.5 que existe $\delta_1 > 0$ tal que

$$f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + \sqrt{\gamma} g_k^T d_k$$

para todo $\alpha \in (0, \delta_1]$. Seja $\delta = \min\{\delta_1, \frac{(\gamma_1 - \sqrt{\gamma_1}) g_k^T d_k}{\nu \|d_k\|}\}$, então, se $\alpha \in (0, \delta]$ temos que $\alpha \leq \frac{(\gamma_1 - \sqrt{\gamma_1}) g_k^T d_k}{\nu \|d_k\|}$ e donde

$$\gamma_1 \alpha g_k^T d_k - \nu \alpha^2 \|d_k\|^2 \geq \sqrt{\gamma_1} \alpha g_k^T d_k$$

e, portanto,

$$f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + \sqrt{\gamma_1} \alpha g_k^T d_k \leq f(x_k) + \gamma_1 \alpha g_k^T d_k - \nu \alpha^2 \|d_k\|^2.$$

O processo de encontrar um comprimento do passo adequado é dado pelo próximo algoritmo.

Algoritmo 3.27 Backtracking do critério ZZL

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $\sigma, \gamma \in (0, 1)$, $\nu > 0$ e $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$ tais que $g_k^T d_k < 0$

Defina $\alpha = \bar{\alpha}_k$

REPITA enquanto $f(x_k + \alpha_k d_k) > f(x_k) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k - \nu \alpha_k^2 \|d_k\|^2$

$$\alpha = \sigma \alpha$$

Escolha $\alpha_k = \alpha$

O resultado de convergência para este critério é dado pelo seguinte teorema.

Teorema 3.28 Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável em \mathbb{R}^n . Suponhamos que o conjunto de nível $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq f(x_0)\}$ é limitado e que o gradiente ∇f de f é Lipschitz contínuo em alguma vizinhança $V(\Omega)$ de Ω . Se d_k é a direção dada pelo método de Fletcher-Reeves e o comprimento do passo α_k é obtido pela busca unidirecional (3.24), temos

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \quad (3.25)$$

Demonstração: Veja [39]. ■

Notamos que a condição (3.25) é mais fraca do que a condição

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

A condição (3.25) diz apenas que existe pelo menos uma subsequência de $\{\|g_k\|\}$ que converge para zero, enquanto a condição (3.3) diz que toda a sequência $\{\|g_k\|\}$ converge a zero.

Observação 3.29 *A teoria de convergência é obtida para direções específicas do método do Gradiente Conjugado, mas pela Observação 3.26 podemos aplicar a busca unidirecional para qualquer método que forneça direções tais que $g_k^T d_k < 0$. Em particular, podemos aplicar para o método BFGS. No Capítulo 5, aplicamos o critério ZZL para o método Quase Newton BFGS, mesmo sem garantias de convergência, motivados a realizar comparações de buscas unidirecionais, sempre com a mesma direção.*

Capítulo 4

BUSCAS UNIDIRECIONAIS NÃO MONÓTONAS

Neste capítulo, apresentamos os critérios de buscas unidirecionais não monótonas, isto é, os critérios que geram uma sequência de iterandos $\{x_k\}$ tal que a respectiva sequência de valores de função $\{f(x_k)\}$ não é, necessariamente, monótona. O critério precursor desta classe foi a busca unidirecional de Grippo, Lampariello e Lucidi proposta em [21] originalmente para solução de problemas de Otimização Irrestrita utilizando o método de Newton. Resultados numéricos neste artigo apontam a eficiência deste critério, especialmente para problemas que possuem os chamados “vales estreitos e curvados”. A justificativa apontada pelos autores para a utilização de buscas unidirecionais não monótonas está no fato de que em muitos problemas irrestritos “a sequência de iterandos pode caminhar pelo fundo de vales estreitos e curvados, o que frequentemente ocorre em problemas difíceis”. A Seção 4.1 traz uma discussão desse termo. Detalhamos a proposta de Grippo, Lampariello e Lucidi nas Seções 4.2, 4.3 e 4.4, onde respectivamente, discutimos as propostas baseadas nos critérios de Armijo, Wolfe, e Goldstein. Os critérios de Dai [11] e de Zhang e Hager [38], também baseados nessas buscas clássicas, são apresentados, respectivamente, nas Seções, 4.5, 4.6, 4.7, 4.8, 4.9 e 4.10. Estas buscas, além das propostas de Grippo, Lampariello e Lucidi, são as buscas não monótonas clássicas, às quais dedicamos a maior parte deste capítulo, estudando a fundo suas teorias de convergência. Além dessas, também são apresentadas buscas que foram, de certa forma, baseadas nas buscas não monótonas clássicas. Discutimos as propostas sem derivadas de Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan [13] e de Cheng e Li [9] nas Seções 4.11 e 4.12, respectivamente. Apresentamos na Seção 4.13 a busca unidirecional não monótona de Shi e Shen [33]. Finalizamos este capítulo com a busca dada por Yin e Du [37], na Seção 4.14, que generaliza algumas das buscas estudadas neste trabalho.

4.1 Vales estreitos e curvados

Nesta seção discutimos a expressão “vales estreitos e curvados” e apresentamos alguns exemplos onde a sequência gerada por um algoritmo pode caminhar pelo fundo destes.

Um vale estreito de uma função é uma região onde suas curvas de nível são estreitas e alongadas. Vales estreitos e curvados podem ser encontrados em muitos problemas de Otimização, geralmente em problemas mal escalados ou em funções penalizadas.

Uma vez que a sequência de iterandos $\{x_k\}$ esteja no interior de um vale estreito e o mínimo esteja em um vale estreito, os critérios de buscas unidirecionais monótonas necessitam de uma redução nos valores de função ($f(x_{k+1}) < f(x_k)$), forçando a sequência a se movimentar em zigue-zague pelo interior do vale. Nestas circunstâncias, o valor de função em cada iteração é pouco reduzido e, desta forma, o algoritmo necessita de muitas iterações e reduções para encontrar um mínimo local. Por outro lado, os critérios de buscas não monótonas permitem aceitar um comprimento do passo que aumenta o valor da função, desta forma possibilitando que a sequência escape das proximidades deste vale, permitindo ao algoritmo gerar passos maiores e reduções mais evidentes nas próximas iterações.

Um exemplo de vale estreito pode ser observado na função *Scaled Rosenbrock* [31] dada por

$$\begin{aligned} f: \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto f(x) = c(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \end{aligned}$$

onde $c \in \mathbb{R}_+^*$. É claro que um minimizador desta função é o ponto $x_* = [1, 1]^T$, e o valor de mínimo é $f(x_*) = 0$.

Na Figura 4.1a consideramos as curvas de nível da função *Scaled Rosenbrock* da forma $f(x) = m$ com $m = 0.5, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$ para o valor da constante de escalamento $c = 100$. A Figura 4.1b é um zoom da Figura 4.1a. Podemos observar a formação de vales estreitos, ou seja, curvas de nível longas e curvadas. A medida que a constante de escalada c na função *Scaled Rosenbrock* é aumentada, os vales se tornam cada vez mais estreitos e alongados.

No que diz respeito às buscas unidirecionais, consideramos na Figura 4.2a um ponto x_k e o ponto solução x_* . Esclarecemos que a curva de nível exterior a qual x_k pertence tem maior valor de função, utilizamos esta curva para representar um possível acréscimo nos valores de função. Consideramos na Figura 4.2b uma direção d_k determinada por algum algoritmo. Na Figura 4.3, indicamos pelos segmentos verde e vermelho, os intervalos que contêm os comprimentos de passo obtidos por uma busca unidirecional monótona e não monótona, respectivamente. Notamos que, nesta situação, um algoritmo com critério de busca não monótona pode produzir um ponto que está mais próximo da solução do que o mesmo algoritmo pode produzir com uma busca unidirecional monótona, e desta forma, com uma busca unidirecional não monótona possivelmente a sequência escapa do vale convergindo para a solução mais rapidamente, utilizando menor quantidade de iterações, de avaliações de função e de gradientes, além de evitar o efeito zigue-zague.

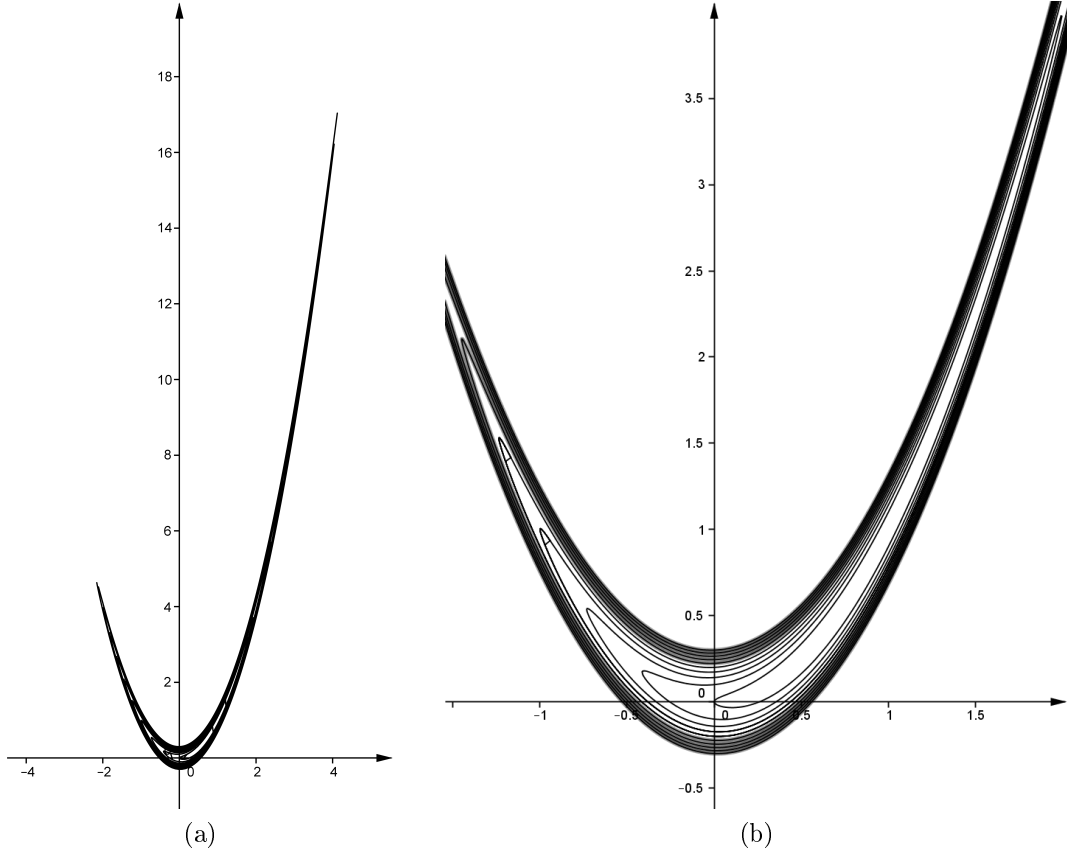


Figura 4.1: Vales estreitos - Curvas de nível da função Scaled Rosenbrock, $c = 100$.

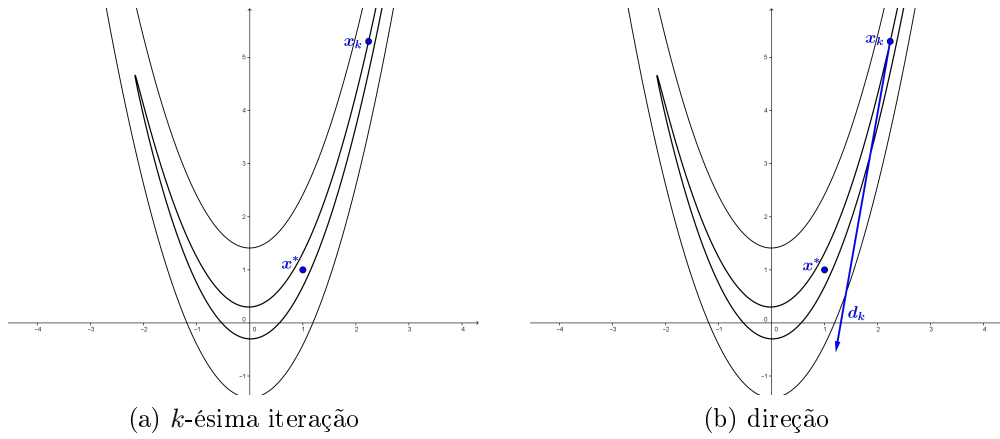


Figura 4.2: Direção de um método em um vale estreito.

4.2 Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi - Tipo Armijo

Apresentamos, nesta seção, o critério de Grippo, Lampariello e Lucidi motivado pela busca de Armijo, o qual foi o critério precursor das buscas unidirecionais não monótonas e que chamaremos abreviadamente por critério **GLLAR**. Discutimos suas variações para as buscas de Wolfe e Goldstein, respectivamente, nas Seções 4.3 e 4.4. Todas essas seções são baseadas na referência [21].

Originalmente esta busca foi motivada pelo método de Newton com a seguinte justifi-

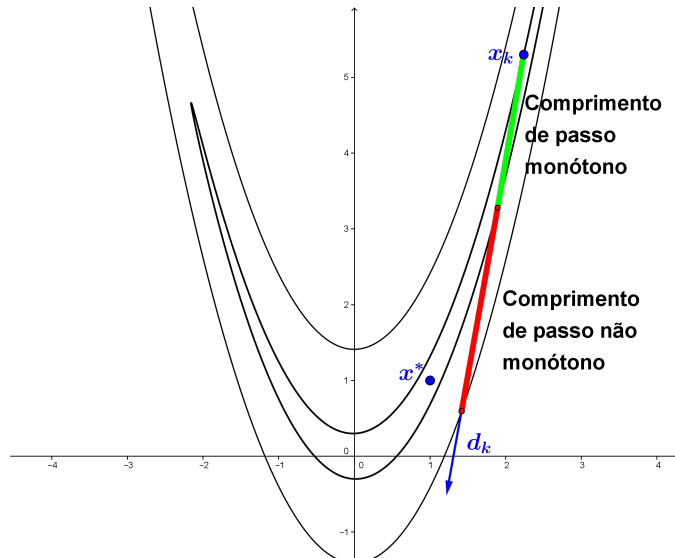


Figura 4.3: Critérios de buscas monótonas e não monótonas em um vale estreito.

cativa: “O uso de uma busca unidirecional em que o comprimento do passo faz a sequência $\{f(x_k)\}$ satisfazer a monotonocidade pode reduzir, consideravelmente, a velocidade de convergência.” Os autores do artigo [21] justificam este fato com o exemplo, onde a precisão utilizada é de 10^{-38} , dado a seguir.

Exemplo 4.1 Considerando a minimização da função de “Rosenbrock”, dada por

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \end{aligned}$$

com $x = [x_1, x_2]^T$ e ponto inicial $x_0 = [-1.2, 1]^T$. Neste caso o método de Newton com passo unitário converge para a solução ótima em 7 iterações. Pode ser observado que, embora as direções de busca sejam de descida, a sequência dos valores de funções não é monótona, como mostrado na Tabela 4.1. Neste mesmo problema, a busca Armijo requer para mesma precisão

Número de iterações	x_1	x_2	f
0	-1.2	1	24.2
1	-1.175	1.381	4.73188
2	0.7631	-3.175	1.4110^4
3	0.7634	0.5828	0.05596
4	1.000	0.944	0.31319
5	1.000	1.000	1.8510^{-11}
6	1.000	1.000	3.4310^{-20}
7	1	1	$< 10^{-38}$

Tabela 4.1: Método de Newton com passo unitário.

22 iterações e 30 avaliações de função.

Nesse sentido, permitir acréscimos nos valores de função, desde que controlados, pode ser uma boa estratégia para resolver o problema (1.1), o que justifica o surgimento das buscas não monótonas.

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção d_k , e parâmetros $\gamma \in (0, 1)$ e $M \in \mathbb{Z}_+$, o critério de Grippo, Lampariello e Lucidi tipo Armijo consiste em encontrar um comprimento do passo α_k tal que

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k, \quad (4.1)$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min\{m(k-1) + 1, M\}$, $k \geq 1$.

O processo de *backtracking* deste critério consiste em aplicar o Algoritmo 3.4 mudando o termo $f(x_k)$ em (3.4) pelo termo $\max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j})$. Explicitamos este algoritmo aqui:

Algoritmo 4.2 Backtracking do critério GLLAr

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $\sigma, \gamma \in (0, 1)$, $m(k) \in \mathbb{N}$ e $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$

Defina $\alpha = \bar{\alpha}_k$

REPITA enquanto $f(x_k + \alpha d_k) > \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \alpha g_k^T d_k$

$\alpha = \sigma \alpha$

Escolha $\alpha_k = \alpha$

A sequência $\{m(k)\}$ deve ser uma sequência de naturais não decrescente (por partes) e limitada superiormente pelo inteiro não negativo M . Observamos que em particular, quando $M = 0$ obtemos o critério de Armijo (3.3), neste sentido, podemos dizer que o critério de GLL generaliza o critério de Armijo.

Além disso, também é sugerido que no início de cada iteração do Algoritmo 2.38 seja testado um número finito de iterações com $M = 0$ e este número é designado por N . Ou seja, estabelece-se o seguinte critério:

$$m(k') = \begin{cases} 0, & \text{para } k' < N \\ \min\{m(k' - 1) + 1, M\}, & \text{para } k' \geq N \end{cases} \quad (4.2)$$

quando $k = k'$. Este procedimento também é utilizado sempre que não for satisfeita alguma hipótese direcional (2.26) e (2.27). Nesse caso, realizamos N buscas monótonas antes de realizar a busca não monótona (4.2), com $M \geq 1$, isto é, tomamos $k' = 0$, e fazemos N iterações realizando a busca unidirecional monótona associada. O próximo exemplo, ilustra o uso desses parâmetros.

Exemplo 4.3 Sejam $M = 2$, $N = 3$ e suponhamos que uma hipótese direcional não é satisfeita na iteração 8. Então a sequência $m(k)$ pode ser definida, por exemplo, como

$$\{m_1(x)\} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 2, 0, 0, 0, 0, 1, \dots),$$

$$\{m_2(x)\} = (0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 1, \dots),$$

$$\{m_3(x)\} = (0, 0, 0, 1, 1, 1, 2, 2, 0, 0, 0, 1, 2, 2, \dots),$$

$$\{m_4(x)\} = (0, 0, 0, 1, 2, 2, 2, 2, 0, 0, 0, 1, 1, 2, \dots),$$

$$\{m_5(x)\} = (0, 0, 0, 1, 1, 1, 2, 2, 0, 0, 0, 1, 2, 2, \dots).$$

$$\{m_6(x)\} = (0, 0, 0, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 0, 0, 1, 0, 1, \dots).$$

Notamos que, nessa situação, até a terceira iteração e da oitava a décima iteração, a sequência $m(k)$ deve ter os termos nulos segundo a definição do parâmetro N . Nos demais termos, a sequência deve ser apenas não decrescente e limitada por $M = 2$. Quando $m(k) = 1$ estamos considerando $\bar{f} = \max\{f(x_k), f(x_{k-1})\}$ e quando $m(k) = 2$ estamos considerando $\bar{f} = \max\{f(x_k), f(x_{k-1}), f(x_{k-2})\}$. Por exemplo, na sequência $m_1(k)$ na iteração 7, onde $m_1(7) = 2$, estamos considerando $\bar{f} = \max\{f(x_7), f(x_6), f(x_5)\}$.

A direção d_k não necessariamente precisa ser uma direção de descida para f em x_k , para que exista um passo α_k satisfazendo (4.1). Embora, como veremos, isto é uma condição necessária para a teoria de convergência. O termo $\bar{f} = \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j})$ é o termo da busca unidirecional que permite acréscimos controlados nos valores de função. Isto quer dizer que, para cada $k \in \mathbb{N}$ fixo, se escolhermos um comprimento do passo α_k pelo critério GLLAr, o termo \bar{f} permite escolher de um ponto $x_k + \alpha_k d_k$ que aumente o valor da função, isto é, que $f(x_k + \alpha_k d_k) > f(x_k)$. Porém este mesmo termo, requer que o comprimento do passo $\alpha_{k+m(k)+1}$ escolhido na iteração $k + m(k) + 1$ satisfaça uma redução no valor de função quando comparada a k -ésima iteração, isto é, a condição $f(x_{k+m(k)+1} + \alpha_{k+m(k)+1} d_{k+m(k)+1}) < f(x_{k+1})$. A representação geométrica desse critério pode ser observada na Figura 4.4.

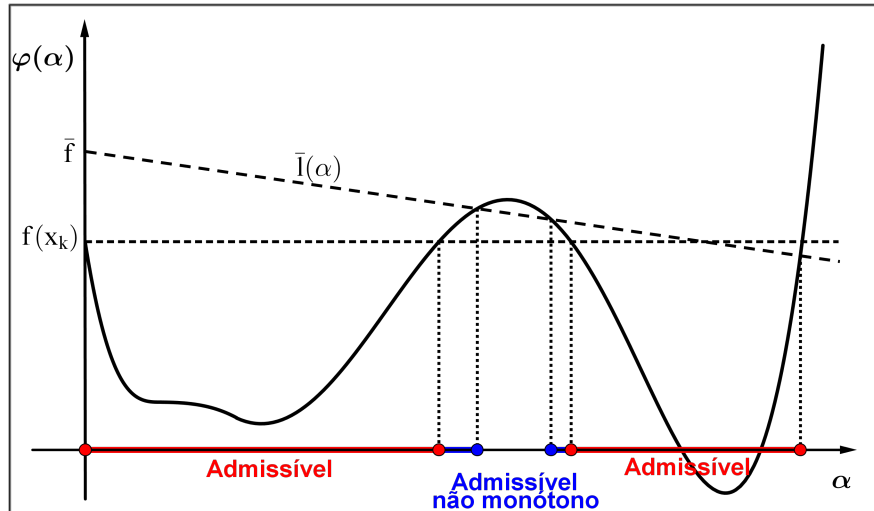


Figura 4.4: Critério de Grippio, Lampariello e Lucidi - tipo Armijo.

O intervalo em azul consiste de todos os comprimentos de passo que podem definir um ponto x_{k+1} que retira a monotocidade da sequência $\{f(x_k)\}$. O conjunto admissível deste critério consiste da união dos intervalos em azul e em vermelho na figura, e quando comparamos com

o conjunto admissível de Armijo apresentado na Figura 3.2, vemos que o critério não monótono é mais tolerante. Assim o conjunto admissível da busca de Armijo está contido no conjunto admissível pela busca de GLLAr.

Refizemos com detalhes adicionais o teorema da referência [21] que garante a convergência do critério GLLAr.

Teorema 4.4 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes continuamente diferenciável em \mathbb{R}^n . Suponhamos que $\{x_k\}$ é uma sequência definida por (1.2), que o conjunto de nível $\Omega_0 := \{x; f(x) \leq f(x_0)\}$ é compacto, que existem números positivos c_1 e c_2 tais que as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) são satisfeitas e que α_k é obtido pelo critério de Grippo, Lamparielo e Lucidi tipo Armijo (4.2), com $\bar{\alpha}_k > 0$, $\sigma \in (0, 1)$, $\gamma \in (0, 1)$ e M um inteiro não negativo. Então:*

- a) a sequência $\{x_k\}$ permanece em Ω_0 e todo ponto limite \bar{x} satisfaz $g(\bar{x}) = 0$;
- b) nenhum ponto limite de $\{x_k\}$ é um máximo local de f ;
- c) se o número de pontos estacionários de f em Ω_0 é finito então a sequência $\{x_k\}$ converge.

Demonstração: Dado $k \in \mathbb{N}$, definamos um índice $l(k) \in [k - m(k), k]$ tal que

$$f(x_{l(k)}) = \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}). \quad (4.3)$$

Segue, desta definição, que

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &= f(x_k + \sigma^h \bar{\alpha}_k d_k) \\ &\leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \sigma^h \bar{\alpha}_k g_k^T d_k \\ &= f(x_{l(k)}) + \gamma \sigma^h \bar{\alpha}_k g_k^T d_k \\ &< f(x_{l(k)}), \end{aligned}$$

onde $h = h(k)$ é o inteiro não negativo tal que $\alpha_k = \sigma^h \bar{\alpha}_k$. Utilizando este fato e as hipóteses direcionais, temos que a sequência $\{f(x_{l(k)})\}$ é não crescente. De fato, como $m(k+1) \leq \min\{m(k) + 1, M\} \leq m(k) + 1$, podemos escrever para todo $k \in \mathbb{N}$ que

$$\begin{aligned} f(x_{l(k+1)}) &= \max_{0 \leq j \leq m(k+1)} f(x_{k+1-j}) \\ &\leq \max_{0 \leq j \leq m(k)+1} f(x_{k+1-j}) \\ &= \max_{0 \leq i \leq m(k)} \{f(x_{k-i}), f(x_{k+1})\} \\ &= \max\{f(x_{l(k)}), f(x_{k+1})\} \\ &= f(x_{l(k)}). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Segue de (4.3) e de (4.4) que

$$f(x_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} \{f(x_{k-j})\} = f(x_{l(k)}) \leq f(x_{l(0)}) = f(x_0)$$

para todo $k \in \mathbb{N}$. Portanto $\{x_k\} \subset \Omega_0$, o que demonstra a primeira afirmação do item **a**). Além disso, Ω_0 é compacto por hipótese, logo pela continuidade de f temos que $\{f(x_{l(k)})\}$ admite um limite ℓ quando $k \rightarrow \infty$, uma vez que $\{f(x_{l(k)})\}$ é monótona.

Portanto, obtemos de (4.1) que para $k > M$,

$$\begin{aligned} f(x_{l(k)}) &= f(x_{l(k)-1} + \alpha_{l(k)-1} d_{l(k)-1}) \\ &\leq \max_{0 \leq j \leq m(l(k)-1)} \{f(x_{l(k)-1-j})\} + \gamma \alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1} \\ &= f(x_{l(l(k)-1)}) + \gamma \alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Por um lado, tomando limite $k \rightarrow \infty$ em (4.5), obtemos

$$\ell \leq \ell + \gamma \lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1},$$

isto é,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1} \geq 0.$$

Por outro lado, como $\alpha_k > 0$ e $g_k^T d_k < 0 \forall k \in \mathbb{N}$, segue que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1} \leq 0.$$

Portanto

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1} = 0. \quad (4.6)$$

Pela hipótese (2.27), temos $\frac{1}{c_2^2} \|d_k\|^2 \leq \|g_k\|^2$, donde $\frac{-c_1}{c_2^2} \alpha_k \|d_k\|^2 \geq -c_1 \alpha_k \|g_k\|^2$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Utilizando a hipótese (2.26), temos que $\alpha_k g_k^T d_k \leq -c_1 \alpha_k \|g_k\|^2 \leq -\frac{c_1}{c_2^2} \alpha_k \|d_k\|^2$ para todo k . Logo,

$$\alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1} \leq \frac{-c_1}{c_2^2} \alpha_{l(k)-1} \|d_{l(k)-1}\|^2 \leq 0$$

para todo $k \in \mathbb{N}$. Tomando limite $k \rightarrow \infty$ e utilizando (4.6), obtemos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{l(k)-1} \|d_{l(k)-1}\|^2 = 0. \quad (4.7)$$

É fácil verificar que, como $\alpha_k \leq \alpha_{\max}$, temos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{l(k)-1} \|d_{l(k)-1}\| = 0. \quad (4.8)$$

De fato, suponhamos por absurdo que $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{l(k)-1} \|d_{l(k)-1}\| \neq 0$. Então, por (4.7), temos que $\lim_{k \rightarrow \infty} \|d_{l(k)-1}\| = 0$, e logo, como $\alpha_k \leq \alpha_{\max}$, temos que $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{l(k)-1} \|d_{l(k)-1}\| = 0$, o que contradiz a hipótese.

Provemos agora que $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|d_k\| = 0$. Seja

$$\hat{l}(k) := l(k + M + 2), \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Primeiro mostremos, por indução em j , que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{\hat{l}(k)-j} \|d_{\hat{l}(k)-j}\| = 0, \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (4.9)$$

e

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{\hat{l}(k)-j}) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{l(k)}), \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (4.10)$$

Estamos assumindo, sem perda de generalidade, que k é suficientemente grande para evitar a ocorrência de índices negativos, ou seja, $\hat{l}(k) \geq j$. Se $j = 1$, como $\{\hat{l}(k)\} \subset \{l(k)\}$, (4.9) segue diretamente de (4.8). Afirmamos que (4.10) vale para $j = 1$. Com efeito, dado $\varepsilon > 0$, como f é uniformemente contínua, existe $\delta > 0$ tal que $\|x - y\| < \delta$ implica $|f(x) - f(y)| < \varepsilon$. Além disso por (4.9) temos que $\|x_{\hat{l}(k)} - x_{\hat{l}(k)-1}\| = \|\alpha_{\hat{l}(k)-1} d_{\hat{l}(k)-1}\| = \alpha_{\hat{l}(k)-1} \|d_{\hat{l}(k)-1}\| \rightarrow 0$. Portanto, temos $\lim_{k \rightarrow \infty} x_{\hat{l}(k)} - x_{\hat{l}(k)-1} = 0$. Assim, dado $\delta > 0$ existe $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que $k \geq k_0$ implica $\|x_{\hat{l}(k)} - x_{\hat{l}(k)-1}\| \leq \delta$. Donde existe $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que $|f(x_{\hat{l}(k)}) - f(x_{\hat{l}(k)-1})| < \varepsilon$. Portanto $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{\hat{l}(k)}) - f(x_{\hat{l}(k)-1}) = 0$ e (4.10) é válida para $j = 1$. Assumimos agora que (4.9) e (4.10) valem para todos os índices menores ou iguais a um j dado. Utilizando (4.1) e (4.3), obtemos

$$\begin{aligned} f(x_{\hat{l}(k)-j}) &= f(x_{\hat{l}(k)-(j+1)} + \alpha_{\hat{l}(k)-(j+1)} d_{\hat{l}(k)-(j+1)}) \\ &\leq \max_{0 \leq i \leq m(\hat{l}(k)-(j+1))} f(x_{\hat{l}(k)-(j+1)-i}) + \gamma \alpha_{\hat{l}(k)-(j+1)} g_{\hat{l}(k)-(j+1)}^T d_{\hat{l}(k)-(j+1)} \\ &= f(x_{l(\hat{l}(k)-(j+1))}) + \gamma \alpha_{\hat{l}(k)-(j+1)} g_{\hat{l}(k)-(j+1)}^T d_{\hat{l}(k)-(j+1)}. \end{aligned}$$

Tomando $k \rightarrow \infty$ temos, utilizando (4.10) como hipótese indutiva, que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{\hat{l}(k)-(j+1)} g_{\hat{l}(k)-(j+1)}^T d_{\hat{l}(k)-(j+1)} = 0.$$

Utilizando o mesmo argumento para obter (4.8) de (4.6), obtemos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_{\hat{l}(k)-(j+1)} \|d_{\hat{l}(k)-(j+1)}\| = 0,$$

o que implica $\|x_{\hat{l}(k)-j} - x_{\hat{l}(k)-(j+1)}\| \rightarrow 0$. Além disso, utilizando a continuidade uniforme de f em Ω_0 e o mesmo argumento do caso $j = 1$, temos que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{\hat{l}(k)-(j+1)}) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{\hat{l}(k)-j}).$$

Agora, pela hipótese de indução, obtemos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{\hat{l}(k)-(j+1)}) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{\hat{l}(k)-j}) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{l(k)}).$$

Então, concluímos que (4.9) e (4.10) valem para qualquer $j \geq 1$ dado.

Afirmamos que para qualquer k , vale

$$x_{k+1} = x_{\hat{l}(k)} - \sum_{j=1}^{\hat{l}(k)-k-1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} d_{\hat{l}(k)-j}. \quad (4.11)$$

De fato,

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_{k+1} + \alpha_{k+1} d_{k+1} - \alpha_{k+1} d_{k+1} \\ &= x_{k+2} - \alpha_{k+1} d_{k+1} \\ &= x_{k+2} + \alpha_{k+2} d_{k+2} - \alpha_{k+2} d_{k+2} - \alpha_{k+1} d_{k+1} \\ &= x_{k+3} - \alpha_{k+2} d_{k+2} - \alpha_{k+1} d_{k+1} \\ &= \dots = \\ &= x_{\hat{l}(k)-2} - \sum_{j=3}^{\hat{l}(k)-k-1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} d_{\hat{l}(k)-j} \\ &= x_{\hat{l}(k)-1} - \alpha_{\hat{l}(k)-2} d_{\hat{l}(k)-2} - \sum_{j=3}^{\hat{l}(k)-k-1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} d_{\hat{l}(k)-j} \\ &= x_{\hat{l}(k)-1} - \sum_{j=2}^{\hat{l}(k)-k-1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} d_{\hat{l}(k)-j} \\ &= x_{\hat{l}(k)} - \alpha_{\hat{l}(k)-1} d_{\hat{l}(k)-1} - \sum_{j=2}^{\hat{l}(k)-k-1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} d_{\hat{l}(k)-j} \\ &= x_{\hat{l}(k)} - \sum_{j=1}^{\hat{l}(k)-k-1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} d_{\hat{l}(k)-j}. \end{aligned}$$

Por (4.3), temos que $\hat{l}(k) - k - 1 = l(k + M + 2) - k - 1 \leq k + M + 2 - k - 1 \leq M + 1$, então (4.11) implica

$$\begin{aligned} \|x_{k+1} - x_{\hat{l}(k)}\| &= \left\| - \sum_{j=1}^{\hat{l}(k)-k-1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} d_{\hat{l}(k)-j} \right\| \\ &\leq \sum_{j=1}^{\hat{l}(k)-k-1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} \|d_{\hat{l}(k)-j}\| \\ &\leq \sum_{j=1}^{M+1} \alpha_{\hat{l}(k)-j} \|d_{\hat{l}(k)-j}\|. \end{aligned}$$

Tomando $k \rightarrow \infty$ e usando (4.9), temos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_{k+1} - x_{l(k)}\| = 0. \quad (4.12)$$

Como $\{f(x_{l(k)})\}$ admite um limite e $\{f(x_{l(k)})\}$ é uma subsequência de $\{f(x_{l(k)})\}$, segue da continuidade uniforme de f em Ω_0 , que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{l(k)}). \quad (4.13)$$

Pela condição (4.1) e definição de $l(k)$, obtemos

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_{l(k)}) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k$$

e utilizando a definição de \hat{l} e (4.13) temos que

$$\lim f(x_{l(k)}) = \lim f(x_{\hat{l}(k)}) = \lim f(x_k).$$

Donde tomando $k \rightarrow \infty$, de (4.13) vemos que $\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k g_k^T d_k = 0$, o que implica, pelos mesmos argumentos utilizados anteriormente, que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|d_k\| = 0 \quad (4.14)$$

e, pela hipótese direcional (2.26), temos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|g_k\|^2 = 0. \quad (4.15)$$

Seja \bar{x} um ponto limite qualquer de $\{x_k\}$ e identificamos por $\{x_k\}_K$ uma subsequência convergente para \bar{x} , isto é, $\lim_{k \rightarrow \infty, k \in K} x_k = \bar{x}$. Então de (4.15) temos duas possibilidades: ou $\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$, o que implica, pela continuidade de ∇f que $\nabla f(\bar{x}) = 0$, ou

$$\lim_{k \rightarrow \infty, k \in K} \alpha_k = 0.$$

Neste caso, como o comprimento do passo α_k foi admitido, existe um índice inteiro \bar{k} tal que, para todo $k \geq \bar{k}, k \in K$, o passo $\frac{\alpha_k}{\sigma}$ foi recusado, donde

$$\begin{aligned} f\left(x_k + \frac{\alpha_k}{\sigma} d_k\right) &> \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \frac{\alpha_k}{\sigma} g_k^T d_k \\ &\geq f(x_k) + \gamma \frac{\alpha_k}{\sigma} g_k^T d_k. \end{aligned}$$

Pelo Teorema do Valor Médio 2.21, podemos encontrar para qualquer $k \geq \bar{k}, k \in K$ um ponto $u_k = x_k + \omega_k \frac{\alpha_k}{\sigma} d_k$ com $\omega_k \in (0, 1)$ tal que

$$\gamma \frac{\alpha_k}{\sigma} g_k^T d_k \leq f\left(x_k + \frac{\alpha_k}{\sigma} d_k\right) - f(x_k) = \nabla f\left(x_k + \omega_k \frac{\alpha_k}{\sigma} d_k\right)^T \frac{\alpha_k}{\sigma} d_k,$$

o que implica que

$$\nabla f(u_k)^T d_k \geq \gamma g_k^T d_k. \quad (4.16)$$

Seja $\{x_k\}_{K_1} \subset \{x_k\}_K$ uma subsequência tal que

$$\lim_{k \rightarrow \infty, k \in K_1} x_k = \bar{x}; \quad \lim_{k \rightarrow \infty, k \in K_1} \frac{d_k}{\|d_k\|} = \bar{d}.$$

Por (4.14), $u_k \rightarrow \bar{x} + 0 = \bar{x}$ quando $k \rightarrow \infty, k \in K_1$. Assim, dividindo ambos os membros de (4.16) por $\|d_k\|$, obtemos

$$\nabla f(u_k)^T \frac{d_k}{\|d_k\|} \geq \gamma g_k^T \frac{d_k}{\|d_k\|},$$

usando a hipótese $f \in \mathbb{C}$ e tomando $k \rightarrow \infty$ em K_1 temos

$$(1 - \gamma) \nabla f(\bar{x})^T \bar{d} \geq 0.$$

Como $1 - \gamma > 0$ e $g_k^T d_k < 0$ para todo k , temos

$$\nabla f(\bar{x})^T \bar{d} = 0,$$

logo da hipótese (2.26) obtemos

$$0 = \nabla f(\bar{x})^T \bar{d} \leq -c_1 \|\nabla f(\bar{x})\|^2 \leq 0,$$

portanto, $\nabla f(\bar{x}) = 0$, e isto completa a prova de **a**).

Para demonstrar **b**), suponhamos por absurdo que existe um ponto limite \bar{x} o qual é um máximo local de f . Segue de (4.12) que existe uma subsequência $\{x_{l(k)}\}_K \subset \{x_{l(k)}\}$ convergindo para \bar{x} . Por outro lado, recordando que $\{f(x_{l(k)})\}$ é uma sequência não crescente e admite um limite, temos $f(x_{l(k)}) \geq f(\bar{x})$ e $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_{l(k)}) = f(\bar{x})$ para todo k . Portanto, de (4.5), considerando $k' = l(k) - 1$ obtemos

$$f(x_{l(k)}) \leq f(x_{l(k)-1}) + \gamma \alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1} < f(x_{l(k')})$$

para todo $k' \geq k + M$, uma vez que $\gamma \alpha_{l(k)-1} g_{l(k)-1}^T d_{l(k)-1} < 0$ e (4.5) é válido para $k > M$, donde $k' = l(k) - 1 \geq k - m(k) - 1 \geq k - m(k + 1) \geq k - M$, isto é, então para $k \in K$ suficientemente grande, podemos encontrar em qualquer vizinhança de \bar{x} um ponto $x_{l(k')}$ tal que $f(x_{l(k')}) > f(x_{l(k)}) \geq f(\bar{x})$. Isto contradiz o fato que \bar{x} é um máximo local.

Para provar a parte **c**), seja Υ o conjunto dos pontos estacionários de f em Ω_0 . Se Γ é o conjunto dos pontos limites de $\{x_k\}$, então pela segunda afirmação do item a) temos que $\Gamma \subset \Upsilon$, donde, Γ é finito. Suponhamos que $\Gamma = \{\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_m\}$ com $m > 1$. Então

$$\delta = \min\{\|\bar{x}_i - \bar{x}_j\|; i \neq j, i, j = 1, \dots, m\} > 0.$$

Como (4.14) vale,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_{k+1} - x_k\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|d_k\| = 0.$$

Pela definição de Γ , podemos escolher $k_0 \geq 0$ tais que $x_k \in \bigcup_{i=1}^m B(\bar{x}_i, \frac{\delta}{4})$ e $\|x_k - x_{k+1}\| \leq \frac{\delta}{4}$ para todo $k \geq k_0$, pois se houvesse infinitos índices tais que $x_k \notin \bigcup_{i=1}^m B(\bar{x}_i, \frac{\delta}{4})$, tais x_k gerariam um subsequência convergente a um ponto fora de Γ , o que é uma contradição. Como \bar{x}_1 é um ponto limite, temos que existe $k_1 \geq k_0$ tal que, $x_{k_1} \in B(\bar{x}_1, \frac{\delta}{4})$, o que implica pela desigualdade triangular que

$$\begin{aligned} \|\bar{x}_i - x_{k_1+1}\| &\geq \|\bar{x}_i - \bar{x}_1\| - (\|\bar{x}_1 - x_{k_1}\| + \|x_{k_1} - x_{k_1+1}\|) \\ &\geq \delta - \frac{2\delta}{4} \\ &= \frac{\delta}{2}, \quad i \geq 2, \end{aligned}$$

donde $x_{k_1+1} \in B(\bar{x}_1, \frac{\delta}{4})$. Por indução, se $x_{k_1+h} \in B(\bar{x}_i, \frac{\delta}{4})$, então

$$\begin{aligned} \|\bar{x}_i - x_{k_1+h+1}\| &\geq \|\bar{x}_i - \bar{x}_1\| - (\|\bar{x}_1 - x_{k_1+h}\| + \|x_{k_1+h} - x_{k_1+h+1}\|) \\ &\geq \delta - \frac{2\delta}{4} \\ &= \frac{\delta}{2}, \quad i \geq 2, \end{aligned}$$

donde $x_{k_1+h+1} \in B(\bar{x}_1, \frac{\delta}{4})$. Portanto, $x_k \in B(\bar{x}_1, \frac{\delta}{4})$ para todo $k \geq k_1$, o que contradiz o fato que $\bar{x}_2, \dots, \bar{x}_m$ são pontos limites de $\{x_k\}$, pois

$$\begin{aligned} \|x_k - \bar{x}_i\| &\geq \|\bar{x}_1 - \bar{x}_i\| - \|x_k - \bar{x}_1\| \\ &\geq \delta - \frac{\delta}{4} \\ &= \frac{3\delta}{4} \quad \text{para } i \geq 2 \text{ e } k \geq k_1. \end{aligned}$$

Portanto, devemos ter $m = 1$, e consequentemente, um único ponto limite. ■

4.3 Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi - Tipo Wolfe

Apresentamos nesta seção o critério de Grippo, Lampariello e Lucidi tipo Wolfe, que chamaremos abreviadamente de critério GGLW. Este critério, que é originado de uma observação feita pelos autores em [21], consiste em realizar a busca de Wolfe Forte, apresentada na Seção 3.4, com a substituição da condição (3.2) pela condição (4.1).

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção d_k , e parâmetros $0 < \gamma < \beta < 1$ e $M \in \mathbb{Z}_+$, o critério de Grippo, Lampariello e Lucidi tipo Wolfe consiste em encontrar um comprimento do

passo α_k que satisfaça, simultaneamente, as condições

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k,$$

e

$$|\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq \beta |g_k^T d_k|,$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min\{m(k-1) + 1, M\}$, $k \geq 1$.

Observamos que o processo para encontrar o comprimento do passo é dado pelo Algoritmo 3.14, com a substituição do termo $f(x_k)$ por $\max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j})$, nas desigualdades (3.14) e (3.15). O parâmetro N novamente é utilizado para indicar o número de iterações iniciais que é realizada a busca unidirecional de Wolfe Forte e além do número de iterações que esta busca monótona é utilizada quando uma das hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) não é satisfeita. Além disso, observamos que o conjunto admissível pelo critério GLLW contém o conjunto admissível do critério WolfF, e está contido no conjunto admissível do critério GLLAr. Com esta observação temos pelo Teorema 3.13 que este critério está bem definido.

Em [21], os autores argumentam que é possível demonstrar os resultados semelhantes aos do Teorema 4.4 com o uso do critério GLLW ao invés de GLLAr.

4.4 Critério de Grippo, Lampariello e Lucidi - Tipo Goldstein

Da mesma forma que na seção anterior, o critério de Grippo, Lampariello e Lucidi tipo Goldstein surge de uma observação feita pelos autores em [21], e consiste em realizar a busca de Goldstein, apresentada na Seção 3.6, com a substituição do elemento $f(x_k)$ presente na condição (3.2) pelo termo $\max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j})$. Denominaremos abreviadamente este critério por GGLG.

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção d_k e parâmetros $0 < \gamma < \rho < 1$ e $M \in \mathbb{Z}_+$, o critério de Grippo, Lampariello e Lucidi tipo Goldstein consiste em encontrar um comprimento do passo α_k que satisfaça a condição

$$f(x_k) + \rho \alpha_k g_k^T d_k \leq f(x_k + \alpha_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k,$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min\{m(k-1) + 1, M\}$, $k \geq 1$.

Observamos que o processo para encontrar o comprimento do passo é dado pelo Algoritmo 3.19, com a substituição do termo $f(x_k)$ pelo termo $\max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j})$ nas condições (3.17) e (3.18). Neste caso parâmetro N representa o número de iterações iniciais que é realizada a busca unidirecional de Goldstein, e também a quantidade desta busca monótona que serão realizadas cada vez que uma das hipóteses direcionais do Teorema 4.4 não for satisfeita. Além disso, observamos que o conjunto admissível pelo critério GLLG contém o conjunto admissível

do critério **Gold**, e está contido no conjunto admissível do critério **GLLAr**. Com esta observação e pelo Teorema 3.18 temos que este critério está bem definido.

Em [21], os autores argumentam que é possível demonstrar os resultados semelhantes aos Teorema 4.4 para o critério **GLLG** em substituição ao critério **GLLAr**.

4.5 Critério de Dai - Tipo Armijo

Nesta seção, apresentamos o critério de Dai baseado na busca de Armijo, que abreviadamente denominamos de critério **DaiAr**. A referência desta seção é o artigo [11]. O resultado de convergência para qualquer critério de busca não monótona obtido pela relação (4.1) também é discutido. Veremos nesta e nas próximas seções que os critérios de Dai deixam os critérios GLL “menos não monótonos”, isto é, intercalando uma quantidade maior de buscas monótonas com as não monótonas.

O critério de Dai tipo Armijo consiste em testar a busca não monótona (4.1) somente para o passo inicial sem realizar o *backtracking*. Caso esta condição não seja satisfeita, procuramos um comprimento do passo que satisfaça a busca monótona de Armijo.

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção d_k , um comprimento do passo inicial $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ onde $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$ e parâmetros $\gamma \in (0, 1)$ e $M \in \mathbb{Z}_+$, o critério de Dai tipo Armijo consiste em testar se o comprimento do passo inicial $\bar{\alpha}_k$ satisfaz a condição

$$f(x_k + \bar{\alpha}_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \bar{\alpha}_k g_k^T d_k,$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min\{m(k-1) + 1, M\}$, $k \geq 1$, e em caso afirmativo, escolhemos como o comprimento do passo $\alpha_k = \bar{\alpha}_k$. Caso contrário, consiste em encontrar um comprimento do passo $\alpha_k = \sigma^h \bar{\alpha}_k$, onde h é o menor número inteiro positivo tal que

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_{k-j}) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k.$$

Sendo assim, o critério **DaiAr** testa o critério de busca não monótona apenas para o passo inicial, ao contrário do critério **GLLAr** que encontra um comprimento do passo pelo critério de busca não monótona. O critério de **DaiAr** torna-se menos não monótono em relação ao critério **GLLAr**. O processo de busca do critério **DaiAr** é descrito no algoritmo abaixo:

Algoritmo 4.5 Busca do critério **DaiAr**

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $\sigma, \gamma \in (0, 1)$, $m(k) \geq 0$ e $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$

SE $f(x_k + \bar{\alpha}_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \bar{\alpha}_k g_k^T d_k$

Escolha $\alpha_k = \bar{\alpha}_k$

CASO CONTRÁRIO encontre α_k pelo backtracking do critério de Armijo (Algoritmo 3.4)

Observamos que, se d_k é uma direção de descida, então, pelo Teorema 3.5, o algoritmo está bem definido.

Dai também demonstra partes do Teorema 4.4 utilizando hipóteses diferentes sobre a função objetivo: ao invés de requerer f duas vezes continuamente diferenciável, requisita que a função f seja continuamente diferenciável e o gradiente ∇f Lipschitz contínuo em \mathbb{R}^n .

Observamos que os resultados de convergência estão, sem perda de generalidade, postos para uma sequência $\{x_k\}$ com k iniciando em um e não em zero, o que foi feito para evitar os índices negativos. Os resultados de convergência foram demonstrados para o critério geral de busca unidirecional não monótona descrito a seguir: Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção d_k , um comprimento do passo inicial $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ onde $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$ e parâmetros $\gamma \in (0, 1)$ e $M \in \mathbb{Z}_+$, consideramos o primeiro inteiro não negativo h_k tal que o comprimento do passo $\alpha_k = \sigma^{h_k} \bar{\alpha}_k$ satisfaz

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k, \quad (4.17)$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min\{m(k-1) + 1, M-1\}$, $k \geq 1$. Notamos que este é o critério (4.1) com $M-1$ igual a M . Além disso, notamos que o critério de Dai é um caso particular da busca (4.17). Apresentamos agora os resultados que garantem que a convergência de algoritmos que utilizam a busca unidirecional não monótona (4.17). O próximo resultado foi baseado em [11] e reescrito com detalhes adicionais.

Lema 4.6 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável. Suponhamos que f é limitada inferiormente com o gradiente ∇f Lipschitz contínuo em \mathbb{R}^n , com constante L . Consideramos qualquer método iterativo onde $\{x_k\}$ é gerada pela fórmula (1.2) com d_k direção de descida e α_k é obtido pela busca linear não monótona (4.17). Então, para qualquer $l \geq 1$,*

$$\max_{1 \leq i \leq M} f(x_{Ml+i}) \leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}) + \gamma \max_{0 \leq i \leq M-1} \{\alpha_{Ml+i} g_{Ml+i}^T d_{Ml+i}\}. \quad (4.18)$$

Além disso, temos que

$$\sum_{l \geq 1} \min_{0 \leq i \leq M-1} \left\{ |g_{Ml+i}^T d_{Ml+i}|, \frac{(g_{Ml+i}^T d_{Ml+i})^2}{\|d_{Ml+i}\|^2} \right\} < +\infty. \quad (4.19)$$

Demonstração: Para provar (4.18), é suficiente mostrar que, para $j = 1, \dots, M$, vale

$$f(x_{Ml+j}) \leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}) + \gamma \alpha_{Ml+j-1} g_{Ml+j-1}^T d_{Ml+j-1}. \quad (4.20)$$

Mostramos por indução sobre j . Começamos considerando $j = 1$, pela condição (4.17) com $k = Ml$, temos que

$$f(x_{Ml+1}) \leq \max_{1 \leq i \leq m(Ml)} f(x_{Ml-i}) + \gamma \alpha_{Ml} g_{Ml}^T d_{Ml}. \quad (4.21)$$

Como $m(Ml) \leq M-1$, segue que

$$\max_{1 \leq i \leq m(Ml)} f(x_{Ml-i}) \leq \max_{0 \leq i \leq M-1} f(x_{Ml-i})$$

$$\begin{aligned}
&= \max_{0 \leq i \leq M-1} f(x_{M(l-1)-i+M}) \\
&= \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}).
\end{aligned}$$

Assim, para $j = 1$, temos que

$$\max_{1 \leq i \leq m(Ml)} f(x_{Ml-i}) + \gamma \alpha_{Ml} g_{Ml}^T d_{Ml} \leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}) + \gamma \alpha_{Ml+j-1} g_{Ml+j-1}^T d_{Ml+j-1}.$$

Comparando esta desigualdade com (4.21), temos que (4.20) vale para $j = 1$. Suponhamos que (4.20) vale para qualquer $1 \leq j \leq M - 1$. Como d_k é uma direção de descida, obtemos

$$\begin{aligned}
f(x_{Ml+j_0}) &\leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}) + \gamma \alpha_{Ml+j_0-1} g_{Ml+j_0-1}^T d_{Ml+j_0-1} \\
&\leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i})
\end{aligned}$$

para todo $1 \leq j_0 \leq j \leq M - 1$. Donde

$$\max_{1 \leq j_0 \leq j} f(x_{Ml+j_0}) \leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}). \quad (4.22)$$

Tomando $j = M - 1$ e $j_0 = j$ em (4.22), temos

$$\max_{1 \leq j \leq M-1} f(x_{Ml+j}) \leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}). \quad (4.23)$$

Agora, respectivamente das condições (4.17) com $k = Ml + j$, do fato que $m(Ml + j) \leq M - 1$ e reescrevendo o máximo, fazendo as mudanças de variáveis $u = j - i$ e $n = j - i + M$, utilizando novamente a definição de máximo e o reescrevendo, da desigualdade (4.23), e finalmente, calculando os valores dos máximos, obtemos

$$\begin{aligned}
f(x_{Ml+j+1}) &\leq \max_{1 \leq i \leq m(Ml+j)} f(x_{Ml+j-i}) + \gamma \alpha_{Ml+j} g_{Ml+j}^T d_{Ml+j} \\
&\leq \max \left\{ \max_{1 \leq i \leq j} f(x_{Ml+j-i}), \max_{j+1 \leq i \leq M-1} f(x_{Ml+j-i}) \right\} \\
&\quad + \gamma \alpha_{Ml+j} g_{Ml+j}^T d_{Ml+j} \\
&\leq \max \left\{ \max_{0 \leq u \leq j-1} f(x_{Ml+u}), \max_{j+1 \leq n \leq M-1} f(x_{M(l-1)+n}) \right\} \\
&\quad + \gamma \alpha_{Ml+j} g_{Ml+j}^T d_{Ml+j} \\
&\leq \max \left\{ \max_{0 \leq u \leq M-1} f(x_{Ml+u}), \max_{1 \leq n \leq M-1} f(x_{M(l-1)+n}) \right\} \\
&\quad + \gamma \alpha_{Ml+j} g_{Ml+j}^T d_{Ml+j} \\
&\leq \max \left\{ f(x_{Ml}), \max_{1 \leq u \leq M-1} f(x_{Ml+u}), \max_{1 \leq n \leq M+1} f(x_{M(l-1)+n}) \right\} \\
&\quad + \gamma \alpha_{Ml+j} g_{Ml+j}^T d_{Ml+j} \\
&\leq \max \left\{ f(x_{Ml}), \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}), \max_{1 \leq n \leq M-1} f(x_{M(l-1)+n}) \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \gamma \alpha_{Ml+j} g_{Ml+j}^T d_{Ml+j} \\
& = \max \left\{ \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}), \max_{1 \leq n \leq M-1} f(x_{M(l-1)+n}) \right\} \\
& + \gamma \alpha_{Ml+j} g_{Ml+j}^T d_{Ml+j} \\
& \leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}) + \gamma \alpha_{Ml+j} g_{Ml+j}^T d_{Ml+j}.
\end{aligned}$$

Logo, (4.20) é também válido para $j + 1$. Portanto, (4.20) vale para $1 \leq j \leq M$. Desse modo, (4.18) é válido. Provemos agora (4.19). Como f é limitada inferiormente, segue que

$$\max_{1 \leq i \leq M} f(x_{Ml+i}) > -\infty, \forall l \in \mathbb{N}.$$

Somando (4.18) sobre l , obtemos, para todo $N \in \mathbb{N}$, que

$$\sum_{l=1}^N \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{Ml+i}) \leq \sum_{l=1}^N \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{M(l-1)+i}) + \gamma \sum_{l=1}^N \max_{0 \leq i \leq M-1} \{\alpha_{Ml+i} g_{Ml+i}^T d_{Ml+i}\},$$

e portanto

$$\max_{1 \leq i \leq M} f(x_{MN+i}) \leq \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{0+i}) + \gamma \sum_{l=1}^N \max_{0 \leq i \leq M-1} \{\alpha_{Ml+i} g_{Ml+i}^T d_{Ml+i}\},$$

donde

$$\begin{aligned}
\sum_{l=1}^N \min_{1 \leq i \leq M-1} \{-\alpha_{Ml+i} g_{Ml+i}^T d_{Ml+i}\} & < \frac{1}{\gamma} \left(\max_{1 \leq i \leq M} f(x_i) - \max_{1 \leq i \leq M} f(x_{MN+i}) \right) \\
& < +\infty.
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Donde, para todo $N \in \mathbb{N}$ temos que

$$\sum_{l=1}^N \min_{1 \leq i \leq M-1} \{-\alpha_{Ml+i} g_{Ml+i}^T d_{Ml+i}\} < +\infty. \tag{4.25}$$

Portanto, tomando $N \rightarrow \infty$ em (4.25), obtemos

$$\sum_{l \geq 1}^N \min_{1 \leq i \leq M-1} \{-\alpha_{Ml+i} g_{Ml+i}^T d_{Ml+i}\} < +\infty.$$

Nossa intenção agora é provar que a sequência $\{\alpha_k\}$ é limitada inferiormente. Suponhamos primeiramente que (4.17) é falsa para o comprimento do passo inicial $\bar{\alpha}_k \in (\alpha_{\min}, \alpha_{\max})$. Então, pelo menos uma busca unidirecional (4.17) foi realizada, donde o comprimento do passo anterior $\frac{\alpha_k}{\sigma}$ ao passo aceito α_k , não satisfaz (4.17), e logo pela definição de máximo, temos que

$$f\left(x_k + \frac{\alpha_k}{\sigma} d_k\right) > \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \frac{\alpha_k}{\sigma} g_k^T d_k$$

$$\geq f(x_k) + \gamma \frac{\alpha_k}{\sigma} g_k^T d_k. \quad (4.26)$$

Pelos Teoremas 2.22 e 2.4 e como ∇f é Lipschitz contínuo com constante L , segue, para todo $k \in \mathbb{N}$, que

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha d_k) - f(x_k) &= \alpha g_k^T d_k + \int_0^\alpha (\nabla f(x_k + td_k) - g_k)^T d_k dt \\ &\leq \alpha g_k^T d_k + \int_0^\alpha \|\nabla f(x_k + td_k) - g_k\| \|d_k\| dt \\ &\leq \alpha g_k^T d_k + \int_0^\alpha L \|td_k\| \|d_k\| dt \\ &\leq \alpha g_k^T d_k + \int_0^\alpha tL \|d_k\|^2 dt \\ &= \alpha g_k^T d_k + \alpha L \|d_k\|^2 \int_0^\alpha t dt \\ &= \alpha g_k^T d_k + \frac{1}{2} \alpha^2 L \|d_k\|^2 \\ &\leq \alpha \left(g_k^T d_k + \frac{2(1-\gamma)}{L} \frac{|g_k^T d_k|}{\|d_k\|^2} \frac{L \|d_k\|^2}{2} \right) \\ &= \alpha (g_k^T d_k + (1-\gamma)(-g_k^T d_k)) \\ &= \gamma \alpha g_k^T d_k \end{aligned} \quad (4.27)$$

para todo $\alpha \in \left(0, \frac{2(1-\gamma)}{L} \frac{|g_k^T d_k|}{\|d_k\|^2}\right]$. Como (4.27) é o contrário de (4.26), e como $\frac{\alpha_k}{\sigma}$ satisfaz (4.26), segue que

$$\frac{\alpha_k}{\sigma} \geq \frac{2(1-\gamma)}{L} \frac{|g_k^T d_k|}{\|d_k\|^2}.$$

Agora, se (4.17) é verdadeira para o comprimento do passo inicial $\bar{\alpha}_k$, então temos $\alpha_k \geq \alpha_{\min}$. Em qualquer caso, existe uma constante $c = \frac{2(1-\gamma)\sigma}{L} > 0$ tal que

$$\alpha_k \geq \min \left\{ \alpha_{\min}, \frac{c |g_k^T d_k|}{\|d_k\|^2} \right\}.$$

Portanto

$$\alpha_k |g_k^T d_k| \geq \min \left\{ \alpha_{\min} |g_k^T d_k|, \frac{c |g_k^T d_k|^2}{\|d_k\|^2} \right\},$$

e logo, como d_k é direção de descida para f em x_k temos

$$\begin{aligned} -\alpha_k g_k^T d_k &= \alpha_k |g_k^T d_k| \\ &\geq \min \left\{ \alpha_{\min} |g_k^T d_k|, \frac{c |g_k^T d_k|^2}{\|d_k\|^2} \right\} \\ &\geq \min \{ \alpha_{\min}, c \} \min \left\{ |g_k^T d_k|, \frac{|g_k^T d_k|^2}{\|d_k\|^2} \right\}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Restringindo a desigualdade (4.28) a $k = Ml$ e tomando o mínimo temos

$$\min_{1 \leq i \leq M-1} \{-\alpha_{Ml} g_{Ml}^T d_{Ml}\} \geq \min\{\alpha_{\min}, c\} \min \left\{ |g_{Ml}^T d_{Ml}|, \frac{|g_{Ml}^T d_{Ml}|^2}{\|d_{Ml}\|^2} \right\}.$$

Finalmente, somando em $1 \leq l \leq N$, tomando $N \rightarrow \infty$ e utilizando (4.24) temos que

$$\sum_{l \geq 1} \min \left\{ |g_k^T d_k|, \frac{|g_k^T d_k|^2}{\|d_k\|^2} \right\} \leq \frac{1}{\max\{\alpha_{\min}, c\}} \sum_{l \geq 1} \min_{1 \leq i \leq M-1} \{-\alpha_k g_k^T d_k\} < \infty,$$

o que implica na validade de (4.19). ■

Observação 4.7 *Da relação (4.18), vemos que, para qualquer método com busca unidirecional não monótona, a sequência $\left\{ \max_{1 \leq k \leq M} f(x_{Ml+l}) \right\}$ é monótona estritamente decrescente.*

O próximo teorema foi proposto em [11], e reproduzimos sua demonstração com detalhes adicionais. Este resultado de convergência é demonstrado mediante ao Lema 4.6 e tem como caso particular o Teorema 3.6.

Teorema 4.8 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável. Suponhamos que f é limitada inferiormente em \mathbb{R}^n e que o gradiente ∇f é Lipschitz contínuo em \mathbb{R}^n , com constante L . Consideramos qualquer método iterativo (1.2), onde d_k satisfaça (2.26) e (2.27) e α_k é obtido pelo critério (4.17). Então, existe uma constante c_4 tal que*

$$\|g_{k+1}\| \leq c_4 \|g_k\|, \quad \text{para todo } k. \quad (4.29)$$

Além disso, temos que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \quad (4.30)$$

Demonstração: Notamos que $\alpha_k \leq \alpha_{\max}$, logo, por (1.2) e (2.27), temos que

$$\|x_{k+1} - x_k\| = \alpha_k \|d_k\| \leq c_2 \alpha_{\max} \|g_k\|. \quad (4.31)$$

Pelo fato de ∇f ser Lipschitz, temos que

$$\|g_{k+1} - g_k\| \leq L \|x_{k+1} - x_k\| \leq c_2 \alpha_{\max} L \|g_k\|,$$

donde

$$\begin{aligned} \|g_{k+1}\| &\leq \|g_{k+1} - g_k\| + \|g_k\| \\ &\leq c_2 \alpha_{\max} L \|g_k\| + \|g_k\| \\ &= (c_2 \alpha_{\max} L + 1) \|g_k\|, \end{aligned}$$

então (4.29) vale com

$$c_4 = 1 + c_2 \alpha_{\max} L.$$

Afirmamos que

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \|g_{Ml+\phi(l)}\| = 0, \quad (4.32)$$

onde $0 \leq \phi(l) \leq M-1$. De fato, das hipóteses direcionais (2.26) e (2.27), obtemos $\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^2 \|g_k\|^2 \leq \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2}$, donde, novamente por (2.26) temos, para todo $k \in \mathbb{N}$, que

$$\|g_k\|^2 \leq \min \left\{ \frac{1}{c_1} |g_k^T d_k|, \left(\frac{c_2}{c_1}\right)^2 \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \right\},$$

e logo

$$\|g_k\|^2 \leq \min \left\{ \frac{1}{c_1}, \left(\frac{c_2}{c_1}\right)^2 \right\} \min \left\{ |g_k^T d_k|, \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \right\}. \quad (4.33)$$

Agora, se $\lim \|g_{Ml-\phi(l)}\| \neq 0$, então existem uma subsequência $\{\|g_{Ml'-\phi(l')}\|\}$ e um escalar $\delta > 0$ tais que $\|g_{Ml'-\phi(l')}\|^2 \geq \delta > 0$ para todo $l' \in \mathbb{N}' \subset \mathbb{N}$, e logo por (4.33) temos que

$$\min \left\{ |g_{Ml'-\phi(l')}^T d_{Ml'-\phi(l')}|, \frac{(g_{Ml'-\phi(l')}^T d_{Ml'-\phi(l')})^2}{\|d_{Ml'-\phi(l')}\|^2} \right\} \geq \frac{\delta}{\max \left\{ \frac{1}{c_1}, \left(\frac{c_2}{c_1}\right)^2 \right\}} > 0$$

para todo $l' \in \mathbb{N}'$, o que contradiz (4.19), pois toda subsequência de $\min \left\{ |g_k^T d_k|, \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \right\}$ deveria convergir para zero. Portanto, temos (4.32). Por (4.29), e como a diferença entre $(M(l+1)-i)$ e $(Ml+\phi(l))$ é menor ou igual que $2M$, para todo $i = 0, 1, \dots, M-1$. Segue que

$$\|g_{M(l+1)+i}\| \leq c_4^{2M} \|g_{Ml+\phi(l)}\|, \quad \text{para } i = 0, \dots, M-1. \quad (4.34)$$

Tomando $l \rightarrow \infty$ em (4.34) e utilizando (4.32) temos que

$$0 \leq \lim_{l \rightarrow \infty} \|g_{M(l+1)+i}\| \leq c_4^{2M} \lim_{l \rightarrow \infty} \|g_{Ml+\phi(l)}\| = 0.$$

E logo

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \|g_{M(l+1)+i}\| = 0$$

para todo $i = 0, 1, \dots, M-1$. Portanto, reorganizando os termos temos que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

■

Assim, pelo Teorema de Bolzano-Weierstrass, temos que, no caso onde o conjunto de nível

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq f(x_1)\}$$

é limitado, a relação (4.30) implica que todo ponto limite de $\{x_k\}$ é um ponto estacionário de f . Além disso, segue de (4.30) e (4.31) que $x_{k+1} - x_k$ tende para zero quando $k \rightarrow \infty$. Isto mostra que, se o número de pontos estacionários de f em Ω é finito, a sequência $\{x_k\}$ converge.

Na referência [11], podemos encontrar outro resultado de convergência onde a hipótese direcional (2.27) é substituída pela hipótese de que existem constantes positiva ψ_1 e ψ_2 tais que

$$\|d_k\|^2 \leq \psi_1 + \psi_2 k, \quad (4.35)$$

para todo $k \in \mathbb{N}$.

O seguinte teorema mostra que qualquer método iterativo usando a busca unidirecional não monótona (4.1) tem convergência r -linear para funções uniformemente convexas.

Teorema 4.9 *Suponhamos que f seja continuamente diferenciável e uniformemente convexa. Consideramos qualquer método iterativo (1.2), onde d_k satisfaz (2.26) e (2.27) e α_k é obtido pela busca linear não monótona (4.17). Então, existem constantes $c_5 > 0$ e $c_6 \in (0, 1)$ tais que*

$$f(x_k) - f(x_*) \leq c_5 c_6^k [f(x_1) - f(x_*)].$$

Demonstração: Veja [11]. ■

4.6 Critério de Dai - Tipo Wolfe

O critério de Dai tipo Wolfe, que nos referimos abreviadamente por critério DaiW, consiste em testarmos a busca não monótona (4.3) com a condição (3.13) somente para o passo inicial, e caso esta condição não seja satisfeita, procurarmos um comprimento do passo que satisfaça a busca monótona de Wolfe.

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção d_k , $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, um comprimento do passo inicial $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ e parâmetros $0 < \gamma < \beta < 1$ e $M \in \mathbb{Z}_+$, o critério de Dai tipo Wolfe consiste em testar se o comprimento do passo $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, com $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$ satisfaz, simultaneamente, as condições

$$f(x_k + \bar{\alpha}_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \bar{\alpha}_k g_k^T d_k,$$

e

$$|\nabla f(x_k + \bar{\alpha}_k d_k)^T d_k| \leq \beta |g_k^T d_k|,$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min\{m(k-1) + 1, M\}$, $k \geq 1$, e em caso afirmativo, escolhemos $\alpha_k = \bar{\alpha}_k$. Caso contrário, consiste em encontrar um comprimento do passo α_k que satisfaça, simultaneamente, as condições

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k$$

e

$$|\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq \beta |g_k^T d_k|.$$

O processo para encontrar um comprimento do passo aceitável pelo critério DaiW é descrito no algoritmo abaixo:

Algoritmo 4.10 *Busca para o critério DaiW*

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $0 < \gamma < \beta < 1$, $m(k) \geq 0$ e $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$

SE $f(x_k + \bar{\alpha}_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \bar{\alpha}_k g_k^T d_k$ e $|\nabla f(x_k + \bar{\alpha}_k d_k)^T d_k| \leq \beta |g_k^T d_k|$

Escolha $\alpha_k = \bar{\alpha}_k$

CASO CONTRÁRIO encontre α_k pela busca do critério de Wolfe Forte (Algoritmo 3.14)

Observamos que se d_k é uma direção de descida, então pelo Teorema 3.13 o algoritmo está bem definido. Além disso, conforme sugerido em [11], demonstram-se resultados de convergência semelhantes aos da Sessão 4.5 para o critério DaiW.

4.7 Critério de Dai - Tipo Goldstein

O critério de Dai tipo Goldstein, denominaremos abreviadamente de critério DaiG, consiste em testarmos a busca não monótona (4.3) somente para o passo inicial, e caso esta condição não seja satisfeita, passamos a procurar um comprimento do passo que satisfaça as condições monótonas da busca de Goldstein (3.6).

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção d_k , um comprimento do passo inicial $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, com $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$ e parâmetros $0 < \gamma < \rho < 1$ e $M \in \mathbb{Z}_+$, o critério de Dai tipo Goldstein consiste em testar se o comprimento do passo $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, com $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$ satisfaz a condição

$$f(x_k) + \rho \bar{\alpha}_k g_k^T d_k \leq f(x_k + \bar{\alpha}_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \bar{\alpha}_k g_k^T d_k,$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min\{m(k-1) + 1, M\}$, $k \geq 1$, e em caso afirmativo, escolhemos $\alpha_k = \bar{\alpha}_k$. Caso contrário, encontramos um comprimento do passo α_k que satisfaça a condição

$$f(x_k) + \rho \alpha_k g_k^T d_k \leq f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \gamma \alpha_k g_k^T d_k.$$

O processo para encontrar um comprimento do passo aceitável pelo critério DaiG é descrito no algoritmo abaixo:

Algoritmo 4.11 *Busca para o critério DaiG*

Dados $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, $0 < \gamma < \rho < 1$, $m(k) \geq 0$ e $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$

SE $f(x_k) + \rho \bar{\alpha}_k g_k^T d_k \leq f(x_k + \bar{\alpha}_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \bar{\alpha}_k g_k^T d_k$

Escolha $\alpha_k = \bar{\alpha}_k$

CASO CONTRÁRIO encontre α_k pela busca para o critério de Goldstein (Algoritmo 3.19)

Observamos que se d_k é uma direção de descida, então pelo Teorema 3.18 o Algoritmo 4.11 está bem definido. Além disso, conforme sugerido em [11] demonstram-se resultados de convergência semelhantes aos da Sessão 4.5 para o critério **DaiG**.

A seguinte observação, apontada por Dai em [11], sugere uma certa dificuldade da escolha do parâmetro M .

Observação 4.12 *Embora um método iterativo aplicado para funções fortemente convexas possa gerar sequências que têm convergência r -linear, pode acontecer das iterações não satisfazerem a condição (4.1) para k suficientemente grande e para qualquer M limitado. Isto sugere uma dificuldade na escolha do parâmetro M de maneira, que independentemente do parâmetro M utilizado, existem sequências que possuem boa convergência que podem ser barradas pelo critério (4.1).*

O seguinte exemplo foi retirado de [11]. Dai não demonstra o exemplo, e por isso, fizemos a demonstração das propriedades para justificar a observação anterior.

Exemplo 4.13 *Consideramos a função $f(x) = \frac{1}{2}x^2$, com $x \in \mathbb{R}$, $x_1 \neq 0$, $d_k = -x_k$, e ainda $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ com*

$$\alpha_k = \begin{cases} 1 - 2^{-k}, & \text{se } k = i^2, i \in \mathbb{N} \\ 2, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Afirmamos que a sequência $\{x_k\}$ converge r -superlinearmente para $x_ = 0$, mas dado $M > 0$ a condição (4.1) não é satisfeita para k suficientemente grande.*

Com efeito, começamos explicitando alguns termos da sequência

$$\{x_k\} = \left(x_1, \frac{x_1}{2^{1^2}}, -\frac{x_1}{2^{1^2}}, \frac{x_1}{2^{1^2}}, \frac{x_1}{2^{1^2}2^{2^2}}, -\frac{x_1}{2^{1^2}2^{2^2}}, \frac{x_1}{2^{1^2}2^{2^2}}, -\frac{x_1}{2^{1^2}2^{2^2}}, \frac{x_1}{2^{1^2}2^{2^2}}, \frac{x_1}{2^{1^2}2^{2^2}2^{3^2}}, \dots \right),$$

onde x_1 é um ponto inicial. Para mostrar que $\{x_k\}$ é r -superlinearmente convergente para $x_ = 0$, definamos a sequência $\{v_k\}$ por*

$$v_k = \begin{cases} |x_k|, & \text{se } k < 4 \\ \frac{|x_1|}{2^{\frac{\sqrt{k^3}}{6}}}, & \text{se } k \geq 4 \end{cases}$$

Mostramos que $|x_k| \leq v_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$ e que v_k converge q -superlinearmente para $v^ = 0$. De fato, seja $k \in \mathbb{N}$, então k pode ser escrito como $k = i^2 + j$ onde i é o maior número natural tal que i^2 é menor a k e $0 \leq j \leq 2i + 1$. Isto é, estamos considerando $i^2 < k = i^2 + j \leq (i+1)^2$. Segue desta desigualdade que*

$$\sqrt{k^3} \leq (i+1)^3.$$

Temos dois casos para mostrar que $|x_k| \leq v_k$. Se $k < 4$ temos que esta desigualdade vale por construção. No caso em que $k \geq 4$ temos que $i \geq 2$ e logo a desigualdade

$$i^3 - 2i - 1 \geq 0$$

é verdadeira. O que implica em

$$\frac{2i^3 + 3i^2 + i}{6} \geq \frac{i^3 + 3i^2 + 3i + 1}{6}.$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{k^3}}{6} &\leq \frac{(i+1)^3}{6} \\ &= \frac{i^3 + 3i^2 + 3i + 1}{6} \\ &\leq \frac{2i^3 + 3i^2 + i}{6} \\ &= \frac{(i+1)i(2i+1)}{6} \\ &= 1^2 + 2^2 + \dots + i^2. \end{aligned}$$

Assim, dessa desigualdade, temos que

$$2^{\frac{\sqrt{k^3}}{6}} \leq 2^{1^2 + 2^2 + \dots + i^2}.$$

Decorre então que

$$\frac{|x_1|}{2^{\frac{\sqrt{k^3}}{6}}} \geq \frac{|x_1|}{2^{1^2 + 2^2 + \dots + i^2}}$$

e logo $v_k \geq |x_k|$. Portanto, em qualquer caso, temos que $|x_k| \leq v_k$. Além disso, para $k \geq 4$ segue que

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{v_{k+1}}{v_k} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\frac{|x_1|}{2^{\frac{1}{6}\sqrt{(k+1)^3}}}}{\frac{|x_1|}{2^{\frac{1}{6}\sqrt{k^3}}}} \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{2^{\frac{1}{6}(\sqrt{(k+1)^3} - \sqrt{k^3})}} = 0. \end{aligned}$$

o que demonstra que $\{v_k\}$ converge q -superlinearmente para 0. Portanto $\{x_k\}$ converge r -superlinearmente para 0.

Agora, mostramos que $\{x_k\}$ não pode ser gerada por (4.1) para qualquer valor de M . Seja M fixo e suponhamos sem perda de generalidade que $x_1 > 0$, então existe $i \in \mathbb{N}$ tal que $(i+1)^2 - i^2 > M + 1$, assim

$$\begin{aligned} \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) &= \max \left\{ \frac{\left(\frac{\pm x_1}{2^{\sum_{l=1}^i l}} \right)^2}{2} \right\} \\ &= \frac{\left(\frac{x_1}{2^{\sum_{l=1}^i l}} \right)^2}{2} \end{aligned}$$

e nesse caso, se $\{x_k\}$ fosse gerada por (4.1), teríamos, em alguma iteração k , que

$$\begin{aligned} \frac{\left(\frac{x_1}{2^{\sum_{l=1}^i l}}\right)^2}{2} &= f(x_{k+1}) \\ &\leq \frac{\left(\frac{\pm x_1}{2^{\sum_{l=1}^i l}}\right)^2}{2} - \gamma \alpha_k \|x_k\|^2 \end{aligned}$$

donde $\gamma = 0$ o que contradiz o fato de $\gamma \in (0, 1)$. Portanto $\{x_k\}$ não pode ser gerada por (4.1) para k suficientemente grande e qualquer M arbitrário.

4.8 Critério de Zhang e Hager - Tipo Armijo

Nesta seção, apresentamos o critério de busca não monótona que foi proposto por Zhang e Hager em [38], nos referimos a este critério como critério de **ZHAr**. A motivação principal do critério de Zhang e Hager é que nas buscas não monótonas de GLL e Dai, a performance numérica é muito dependente da escolha de M , e que bons valores de função são descartados pelo termo “max” em (4.1). Além disso, como apontado por Dai em [11], dado $M > 0$ e uma função fortemente convexa, temos que existem sequências com convergência r -superlinear que não satisfazem a condição (4.1) para k suficientemente grande, como mostrado no Exemplo 4.13. O critério de Zhang e Hager pode ser também estendido para as buscas de Wolfe e Goldstein. A ideia para superar a dependência do parâmetro M é substituir o termo “max” por um fator C_k que consiste em uma média ponderada dos valores de função anteriores à iteração corrente.

Mais precisamente, dados os parâmetros $0 \leq \eta_{\min} \leq \eta_{\max} \leq 1$, $0 < \gamma < 1$, um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$ e uma direção de busca $d_k \in \mathbb{R}^n$ e definindo $C_0 = f(x_0)$ e $Q_0 = 1$, o critério Zhang e Hager tipo Armijo consiste em aceitar um comprimento do passo α_k que satisfaz a condição

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq C_k + \gamma \alpha_k g_k^T d_k, \quad (4.36)$$

onde

$$C_{k+1} = \frac{\eta_k Q_k C_k + f(x_{k+1})}{Q_{k+1}}, \quad Q_{k+1} = \eta_k Q_k + 1, \quad (4.37)$$

com $\eta_k \in [\eta_{\min}, \eta_{\max}]$.

Observamos primeiro que C_{k+1} é uma combinação convexa de C_k e $f(x_{k+1})$. E como $C_0 = f(x_0)$ e C_k é definido iterativamente, segue que C_k é uma combinação convexa dos valores de função $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_k)$. Além disso, a escolha dos valores η_k controla o grau de não monotonicidade. Mais precisamente, se $\eta_k = 0$ para todo $k \in \mathbb{N}$, então a busca unidirecional recai na busca monótona de Armijo, e nesse sentido podemos dizer que este critério também generaliza o método de Armijo. Por outro lado, se $\eta_k = 1$ para todo $k \in \mathbb{N}$, então $C_k = A_k$, onde

$$A_k = \frac{1}{k+1} \sum_{i=0}^k f(x_i)$$

é média dos valores de função para as iterações de 0 até k . Portanto, notamos que quando η_k se aproxima de 0, a busca **ZHAr** se aproxima da busca unidirecional monótona, e quando η_k aproxima de 1, o método torna-se mais não monótono.

O processo de obtenção de um comprimento do passo para o critério **ZHAr** é realizado como no Algoritmo 3.4 trocando o termo $f(x_k)$ por C_k em (3.4). As atualizações dos parâmetros C_k e Q_k devem ser realizados em um processo externo ao *backtracking*.

Como mostramos no Lema 4.14, para qualquer escolha de $\eta_k \in [0, 1]$, C_k pertence ao intervalo $[f(x_k), A_k]$, implicando que a busca linear atual está bem definida. Os Lemas 4.14, 4.15 e o Teorema 4.16 foram baseados em [39] e refeitos com detalhes adicionais.

Lema 4.14 *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável. Suponhamos que a sequência $\{x_k\}$ é gerada pela recorrência (1.2) onde α_k é calculado pela busca unidirecional não monótona (4.36). Se $g_k^T d_k \leq 0$ para todo k , então $f(x_k) \leq C_k \leq A_k$ para cada k .*

Demonstração: Definimos, para todo $k \in \mathbb{N}$, a aplicação $D_k : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ por

$$D_k(t) = \frac{tC_{k-1} + f(x_k)}{t + 1}.$$

Derivando D_k , temos que

$$D'_k(t) = \frac{C_{k-1} - f(x_k)}{(t + 1)^2}.$$

Como $g_{k-1}^T d_{k-1} \leq 0$, segue de (4.36) que $f(x_k) \leq C_{k-1} + \gamma \alpha_{k-1} g_{k-1}^T d_{k-1} \leq C_{k-1}$, o que implica que $D'_k(t) \geq 0$ para todo $t \geq 0$. Logo D_k não é decrescente e $f(x_k) = D_k(0) \leq D_k(t)$ para todo $t \geq 0$. Em particular, tomando $t = \eta_{k-1} Q_{k-1}$, temos

$$\begin{aligned} f(x_k) &= D_k(0) \\ &\leq D_k(\eta_{k-1} Q_{k-1}) \\ &= \frac{\eta_{k-1} Q_{k-1} C_{k-1} + f(x_k)}{\eta_{k-1} Q_{k-1} + 1} \\ &= C_k, \end{aligned}$$

o que estabelece o limite inferior para C_k da tese. O limite superior $C_k \leq A_k$ é provado por indução. De fato, para $k = 0$ a tese é válida pela construção, pois $C_0 = f(x_0) = A_0$. Suponhamos que temos $C_j \leq A_j$ para todo $0 \leq j \leq k$. Por (4.37), como $Q_0 = 1$, do fato que $\eta_k \in [0, 1]$ temos

$$\begin{aligned} Q_{j+1} &= 1 + \eta_j Q_j \\ &= 1 + \eta_j [1 + \eta_{j-1} Q_{j-1}] \\ &= \dots \\ &= 1 + \sum_{i=0}^j \prod_{m=0}^i \eta_{j-m} \end{aligned}$$

$$\leq 1 + \sum_{i=0}^j 1 = j + 2. \quad (4.38)$$

Como D_k é monótona não decrescente e por definição $Q_k = 1 + \eta_{k-1}Q_{k-1}$, temos que (4.38) para $j = k - 1$ implica em

$$\begin{aligned} C_k &= D_k(\eta_{k-1}Q_{k-1}) \\ &= D_k(Q_k - 1) \\ &\leq D_k(k). \end{aligned} \quad (4.39)$$

e utilizando a hipótese de indução, temos que

$$\begin{aligned} D_k(k) &= \frac{kC_{k-1} + f(x_k)}{k + 1} \\ &\leq \frac{kA_{k-1} + f(x_k)}{k + 1} \\ &= A_k. \end{aligned} \quad (4.40)$$

As relações (4.39) e (4.40) implicam a limitação superior de C_k , como desejado. \blacksquare

Como $f(x_k) \leq C_k$ e como pelo Teorema 3.5 existe $\delta > 0$ tal que a relação (3.2) é satisfeita para todo $\alpha \in [0, \delta]$, temos que

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha d_k) &\leq f(x_k) + \gamma \alpha g_k^T d_k \\ &\leq C_k + \gamma \alpha g_k^T d_k \end{aligned}$$

para todo $\alpha \in [0, \delta]$, o que garante a existência de comprimentos de passo que satisfazem a condição de Zhang e Hager (4.36). O resultado de convergência é obtido com auxílio do seguinte lema.

Lema 4.15 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciável. Consideramos um método iterativo (1.2) onde a direção d_k satisfaz $g_k^T d_k \leq 0$ e α_k é obtido pela busca unidirecional (4.36) onde $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, com $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, e $\sigma \in (0, 1)$. Suponhamos que ∇f é Lipschitz contínuo, com constante de Lipschitz L , para todo x no segmento $[x_k, x_k + \bar{\alpha}_k d_k]$. Então*

$$\alpha_k \geq \min \left\{ \sigma \alpha_{\min}, \frac{2(1 - \gamma) |g_k^T d_k|}{\sigma L \|d_k\|^2} \right\}. \quad (4.41)$$

Demonstração: Se $\alpha_k \geq \sigma \alpha_{\min}$, temos (4.41). Caso contrário, se $\alpha_k < \sigma \alpha_{\min}$, então sendo h_k é o menor inteiro tal que $\alpha_k = \bar{\alpha}_k \sigma^{h_k}$ satisfazendo (4.36), como $f(x_k) \leq C_k$ pelo Lema 4.14, temos

$$f(x_k + \sigma \alpha_k d_k) > C_k + \gamma \sigma \alpha_k g_k^T d_k$$

$$\geq f(x_k) + \gamma \sigma \alpha_k g_k^T d_k. \quad (4.42)$$

Agora, temos pelos Teoremas 2.22 e 2.4, e como ∇f é Lipschitz contínuo, que

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha d_k) - f(x_k) &= \int_0^\alpha \nabla f(x_k + td_k)^T d_k dt \\ &= \alpha g_k^T d_k + \int_0^\alpha [\nabla f(x_k + td_k) - g_k]^T d_k dt \\ &\leq \alpha g_k^T d_k + \int_0^\alpha \|\nabla f(x_k + td_k) - g_k\| \|d_k\| dt \\ &\leq \alpha g_k^T d_k + \int_0^\alpha tL \|d_k\|^2 dt \\ &= \alpha g_k^T d_k + \frac{1}{2} L \alpha^2 \|d_k\|^2. \end{aligned}$$

Portanto, por (4.42), e tomando que $\alpha = \alpha_k \sigma$ na desigualdade acima, obtemos

$$\gamma \alpha_k \sigma g_k^T d_k \leq \alpha_k \sigma g_k^T d_k + \frac{1}{2} L \alpha_k^2 \sigma^2 \|d_k\|^2,$$

ou ainda,

$$0 \leq \frac{2(\alpha_k \sigma g_k^T d_k - \gamma \alpha_k \sigma g_k^T d_k)}{2L\sigma^2 \|d_k\|^2} + \frac{L\alpha_k^2 \sigma^2 \|d_k\|^2}{2L\sigma^2 \|d_k\|^2}$$

donde

$$0 \leq \frac{\alpha_k}{2} \left(\frac{2(1-\gamma)g_k^T d_k}{L\sigma \|d_k\|^2} + \alpha_k \right).$$

Como $\alpha_k > 0$, temos

$$0 \leq \frac{2(1-\gamma)g_k^T d_k}{L\sigma \|d_k\|^2} + \alpha_k,$$

e logo, segue que

$$\begin{aligned} \alpha_k &\geq \frac{2(1-\gamma)g_k^T d_k}{L\sigma \|d_k\|^2} \\ &= \frac{2(\gamma-1)|g_k^T d_k|}{L\sigma \|d_k\|^2} \end{aligned}$$

o que implica em (4.41). ■

Teorema 4.16 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável. Suponhamos que f é limitada inferiormente e que existam constantes positivas c_1 e c_2 tais que as condições (2.26) e (2.27) são satisfeitas. Além disso, assumimos que ∇f é Lipschitz contínuo, com constante de Lipschitz L , em um conjunto aberto que contém o conjunto de nível Ω_0 . Então a sequência $\{x_k\}$ gerada por (1.2) onde α_k é obtido pelo critério de Zhang e Hager de Armijo tem a propriedade de que*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

Além disso, se $\eta_{\max} < 1$, então

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g_k = 0.$$

Demonstração: Mostramos primeiro que

$$f(x_{k+1}) \leq C_k - \varsigma \|g_k\|^2, \quad (4.43)$$

onde

$$\varsigma = \min \left\{ \gamma \sigma \alpha_{\min} c_1, \frac{2\gamma c_1^2(1-\gamma)}{L\sigma c_2^2} \right\}.$$

Caso 1: Se $\alpha_k \geq \sigma \alpha_{\min}$. Por (4.36), (2.26) e (2.26), temos que

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leq C_k + \gamma \alpha_k g_k^T d_k \\ &\leq C_k - \gamma \alpha_k c_1 \|g_k\|^2 \\ &\leq C_k - \gamma \sigma \alpha_{\min} c_1 \|g_k\|^2, \end{aligned}$$

o que implica (4.43).

Caso 2: Se $\alpha_k \leq \sigma \alpha_{\min}$, então por (4.41), temos que

$$\alpha_k \geq \frac{2(1-\gamma)}{\sigma L} \left(\frac{|g_k^T d_k|}{\|d_k\|^2} \right),$$

e por (4.36), temos

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) &\leq C_k - \frac{2\gamma(1-\gamma)(g_k^T d_k)}{\sigma L \|d_k\|} \frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|} \\ &\leq C_k - \frac{2\gamma(1-\gamma)}{\sigma L} \left(\frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|} \right)^2. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Contas rápidas com as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) mostram que

$$\frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|^2} \geq \frac{c_1^2 \|g_k\|^2}{c_2^2}.$$

Substituindo isto em (4.44), obtemos

$$f(x_{k+1}) \leq C_k - \frac{2\gamma c_1^2(1-\gamma)}{\sigma L c_2^2} \|g_k\|^2,$$

o qual implica (4.43).

Combinando as relações (4.37) com o limite superior (4.43), temos que

$$\begin{aligned} C_{k+1} &= \frac{\eta_k Q_k C_k + f(x_{k+1})}{Q_{k+1}} \\ &\leq \frac{\eta_k Q_k C_k + C_k - \varsigma \|g_k\|^2}{Q_{k+1}} \end{aligned}$$

$$= C_k - \frac{\varsigma \|g_k\|^2}{Q_{k+1}}. \quad (4.45)$$

Como f é limitada inferiormente, pelo Lema 4.14 temos que $f(x_k) \leq C_k$ para todo k , o que mostra que a sequência $\{C_k\}$ é limitada inferiormente, digamos por N_1 . Segue de (4.45) que

$$\frac{\varsigma \|g_k\|^2}{Q_{k+1}} \leq C_k - C_{k+1},$$

logo, somando em k até $N_0 \in \mathbb{N}$ temos que

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N_0} \frac{\varsigma \|g_k\|^2}{Q_{k+1}} &\leq \sum_{k=0}^{N_0} C_k - C_{k+1} \\ &= C_0 - C_{N_0} \\ &< N_1 + C_0 \end{aligned}$$

para todo N_0 . Donde

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\|g_k\|^2}{Q_{k+1}} < \infty. \quad (4.46)$$

Se $\|g_k\|$ não for limitada a partir de 0, como $Q_{k+1} \leq k + 2$ por (4.38), segue que

$$\frac{\|g_k\|^2}{Q_{k+1}} > \frac{N_2}{k + 2}$$

para todo $N_2 \in \mathbb{N}$, e assim, a condição (4.46) deve ser violada. Portanto $\{\|g_k\|\}$ é limitada e existe uma subsequência convergindo, e além disso, por (4.46) esta subsequência converge para zero. Assim, (3.25) vale. Agora, se $\eta_{\max} < 1$, então por (4.38),

$$\begin{aligned} Q_{k+1} &= 1 + \sum_{j=0}^k \prod_{i=0}^j \eta_{k-i} \\ &\leq 1 + \sum_{j=0}^k \eta_{\max}^{j+1} \\ &\leq \sum_{j=0}^{\infty} \eta_{\max}^j \\ &= \frac{1}{1 - \eta_{\max}}. \end{aligned}$$

Consequentemente,

$$\frac{\|g_k\|^2}{Q_{k+1}} \geq \frac{\|g_k\|^2}{\frac{1}{1 - \eta_{\max}}}$$

donde

$$(1 - \eta_{\max}) \sum_{k=1}^{\infty} \|g_k\|^2 \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\|g_k\|^2}{Q_{k+1}} < \infty.$$

Portanto, pela condição necessária de convergência de séries temos (3.3). ■

Outro resultado de convergência onde a hipótese direcional (2.27) é substituída pela hipótese (4.35) pode ser encontrada na referência [38]. Um resultado sobre a velocidade de convergência é provado para funções fortemente convexas.

Teorema 4.17 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável. Suponhamos que f é fortemente convexa com minimizador x_* , a direção de busca d_k satisfaz as hipóteses (2.26) e (2.27), além disso, suponhamos $\eta_{\max} < 1$, e a função gradiente ∇f é Lipschitz contínua em um conjunto aberto e limitado que contém o conjunto de nível Ω_0 . Então existe $\omega \in (0, 1)$ tal que*

$$f(x_k) - f(x_*) \leq \omega^k (f(x_0) - f(x_*)),$$

para todo k .

Demonstração: Veja [38]. ■

O próximo resultado garante, sobre certas condições, que métodos aplicados a funções fortemente convexas podem gerar comprimentos de passos satisfazendo a condição (4.36).

Teorema 4.18 *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável e x_* o único minimizador de f . Suponhamos que a sequência $\{f(x_k)\}$ converge r -linearmente para $f(x_*)$, isto é, que existem constantes $\omega \in (0, 1)$ e c tais que $f(x_k) - f(x_*) \leq c\omega^k$ para todo $k \in \mathbb{N}$. Suponhamos que a sequência $\{x_k\}$ está contida em um conjunto convexo K , fechado e limitado, f é fortemente convexa em K , a função gradiente ∇f é Lipschitz contínua em K , as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) são válidas. Se $\eta_{\min} > \omega$, então (4.36) é satisfeita para todo $k \in \mathbb{N}$.*

Demonstração: Veja [38]. ■

Em particular, a sequência do Exemplo 4.13 pode ser gerada pela busca unidirecional de Zhang e Hager, isto decorre do teorema acima, tomando $c = 2|x_1|^2$ e $\omega = \frac{1}{2}$ para demonstrar a convergência r -linear de $\{f(x_k)\}$ e considerando $K = \{x \in \mathbb{R}; |x| \leq 2|x_1|\}$.

4.9 Critério de Zhang e Hager - Tipo Wolfe

Apresentamos nesta seção o critério de Zhang e Hager tipo Wolfe, que abreviadamente denominaremos critério ZHW. Os autores utilizam esta busca em comparações numéricas com os critérios de GLL e de Dai.

Dados os parâmetros $0 \leq \eta_{\min} \leq \eta_{\max} \leq 1$, $0 < \gamma < \beta < 1$, um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção de busca $d_k \in \mathbb{R}^n$ e definimos $C_0 = f(x_0)$ e $Q_0 = 1$. O critério Zhang e Hager tipo Wolfe consiste em aceitar um comprimento do passo α_k que satisfaz as condições

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq C_k + \gamma \alpha_k g_k^T d_k,$$

e

$$|\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq \beta |g_k^T d_k|,$$

onde

$$C_{k+1} = \frac{\eta_k Q_k C_k + f(x_{k+1})}{Q_{k+1}}, \quad Q_{k+1} = \eta_k Q_k + 1,$$

com $\eta_k \in [\eta_{\min}, \eta_{\max}]$.

Notamos que este critério consiste na mesma ideia do critério da seção anterior, ao substituir o termo “max” da busca de GLLW pelo termo C_k , desta forma as observações sobre os parâmetros C_k e η_k feitas na seção anterior continuam fazendo sentido. Além disso, o processo para encontrar um comprimento do passo admissível para este critério é feito mediante o Algoritmo 3.14 com a substituição do termo $f(x_k)$ nas desigualdades (3.14) e (3.15) pelo termo C_k . Como consequência do Lema 4.14 e do Teorema 3.13 o critério está bem definido.

Os autores de [38] apontam que resultados de convergência similares aos da Seção 4.8 valem para o critério ZHW.

4.10 Critério de Zhang e Hager - Tipo Goldstein

Nesta seção, apresentamos o critério de Zhang e Hager tipo Goldstein que denominaremos de critério ZHG. Analogamente às duas seções anteriores, o critério ZHG consiste basicamente em introduzir o parâmetro C_k no lugar do termo “max” da busca não monótona GLLG.

Dados os parâmetros $0 \leq \eta_{\min} \leq \eta_{\max} \leq 1$, $0 < \gamma < \rho < 1$, um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$, uma direção de busca $d_k \in \mathbb{R}^n$ e definimos $C_0 = f(x_0)$ e $Q_0 = 1$. O critério Zhang e Hager tipo Goldstein consiste em aceitar um comprimento do passo α_k que satisfaz as condições

$$f(x_k) + \rho \alpha_k g_k^T d_k \leq f(x_k + \alpha_k d_k) \leq C_k + \gamma \alpha_k g_k^T d_k,$$

onde

$$C_{k+1} = \frac{\eta_k Q_k C_k + f(x_{k+1})}{Q_{k+1}}, \quad Q_{k+1} = \eta_k Q_k + 1,$$

com $\eta_k \in [\eta_{\min}, \eta_{\max}]$.

O processo de encontrar um comprimento do passo para este critério é feito pelo Algoritmo 3.19 com a substituição do termo $f(x_k)$ pelo termo C_k nas condições (3.17) e (3.18). Os autores de [38] apontam que resultados de convergência similares aos da Seção 4.8 podem ser demonstrados para o critério ZHG.

4.11 Critério de Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan

Apresentamos nesta seção o critério de Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan [13], que abreviadamente, chamaremos de critério DMR. Enfatizamos que originalmente este critério de busca unidirecional foi proposto para métodos sem derivadas. Estes são métodos que propõem

a resolução de problemas de minimização sem o uso de derivadas. Esse tipo de método é muito útil quando as derivadas são inacessíveis quer pela sua complexidade, quer pela sua indisponibilidade. Neste contexto, os autores estão interessados em resolver o problema (1.1) onde $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função que tem derivadas parciais contínuas, mas que não podem ser avaliadas.

Dizemos que uma sequência $\{\zeta_k\}$ é somável se sua série é somável, isto é, se

$$\sum_{k=0}^{\infty} \zeta_k \leq \zeta < \infty. \quad (4.47)$$

Consideramos uma sequência $\{\zeta_k\}$ somável e uma sequência $\{\beta_k\}$ de termos positivos tal que, para qualquer subsequência de índices $K \subset \mathbb{N}$,

$$\lim_{k \rightarrow \infty, k \in K} \beta_k = 0 \text{ implica em } \lim_{k \rightarrow \infty, k \in K} g_k = 0. \quad (4.48)$$

Seja ainda M um número inteiro positivo e $x_k \in \mathbb{R}^n$ o iterando corrente. Determinando um conjunto finito D_k de \mathbb{R}^n e um comprimento do passo $\alpha(d)$ para cada direção $d \in D_k$, o critério de Diniz-Ehrhardt, Martínez e Raydan consiste em encontrar um comprimento do passo $\alpha_k = \alpha(d)$, para algum $d_k = d \in D_k$, que satisfaça a condição

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq \min\{M-1, k\}} f(x_{k-j}) + \zeta_k - \alpha_k^2 \beta_k. \quad (4.49)$$

Analizamos o processo de *backtracking* que é realizado nesta busca.

Algoritmo 4.19 Backtracking do critério DMR

Dados um ponto x_k , um conjunto finito $D_k \subset \mathbb{R}^n$, $0 < \tau_{\min} \leq \tau_{\max} < 1$

Defina para todo $d \in D_k$ o comprimento do passo inicial $\alpha(d) = 1$

REPITA enquanto não parar

SE existe $d \in D_k$ tal que $f(x_k + \alpha(d)d) \leq \max_{0 \leq j \leq \min\{M-1, k\}} f(x_{k-j}) + \zeta_k - \alpha(d)^2 \beta_k$

Defina $d_k = d$, $\alpha_k = \alpha(d)$, e pare

CASO CONTRÁRIO

Para cada $d \in D_k$, defina $\alpha_{\text{new}}(d) \in [\tau_{\min} \alpha(d), \tau_{\max} \alpha(d)]$, e faça $\alpha(d) = \alpha_{\text{new}}(d)$

Observamos que, além do termo “max”, o termo ζ_k também permite acréscimo no valor da função no próximo ponto $x_k + \alpha_k d_k$. Além disso, o algoritmo está bem definido, pois $\zeta_k > 0$ garante que (4.49) vale se $\alpha(d)$ é suficientemente pequeno. Notamos, no algoritmo, que cada vez que a condição (4.11) não é satisfeita, diminuimos o comprimento do passo até que encontramos um comprimento do passo aceitável.

Os resultados de convergência associados a este critério estão descritos abaixo.

Teorema 4.20 Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função que tem derivadas parciais contínuas. Suponhamos que $\{x_k\}$ é gerada pelo Algoritmo 4.19 e que $\{f(x_k)\}$ é limitada inferiormente. Além

disso, suponhamos que $d_k \in D_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$, onde D_k é um conjunto finito e (x_*, d) é um ponto limite da subsequência $\{(x_k, d_k)\}_{k \in \mathbb{N}}$. Então

$$\nabla f(x_*)^T d \geq 0.$$

Demonstração: Veja [13]. ■

Suponhamos $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável, limitada inferiormente e com gradiente Lipschitz contínuo em \mathbb{R}^n . Consideramos que a sequência $\{x_k\}$ é gerada pelo Algoritmo 4.19 com $D_k = \{-H_k g_k\}$ onde H_k é a aproximação dada pelo método BFGS satisfazendo $\lambda \leq \|H_k\| \leq \Lambda$, $\forall k \in \mathbb{N}$ onde λ e Λ são escalares positivos. Suponhamos, além disso, que o conjunto de nível $\Omega_\zeta = \{x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq f(x_0) + \zeta\}$ é compacto. Seja x_* um ponto de acumulação arbitrário da sequência $\{x_k\}$ (o ponto x_* existe, pois $\{x_k\}$ pertence a um conjunto compacto). Consideramos a subsequência $\{x_k\}_{N_1}$ tal que $x_k \rightarrow x_*$ em N_1 . Como a função ∇f é Lipschitz contínua temos que $g_k \rightarrow \nabla f(x_*)$ em N_1 . Decorre de (2.31) que a sequência $\{H_k\}$ está em um conjunto compacto. Portanto, existe uma matriz H^* tal que $H_k \rightarrow H^*$ em $N_2 \subset N_1$. Notamos que H^* é definida positiva, pois os autovalores de H_k são limitados inferiormente por uma constante positiva. Portanto, $d_k = -H_k g_k \rightarrow -H^* \nabla f(x_*) = d^*$, em N_2 . Pelo Teorema 4.20, temos que $\nabla f(x_*)^T (-H^* \nabla f(x_*)) \geq 0$, donde $\nabla f(x_*)^T H^* \nabla f(x_*) \leq 0$ o que implica em $\nabla f(x_*) = 0$, pois H^* é definida positiva. Portanto, nessa situação, todo ponto de acumulação é um ponto estacionário da função f .

Corolário 4.21 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função com derivadas parciais contínuas. Suponhamos que x_k , d_k e D_k são como no Teorema 4.20. Além disso, suponhamos que o conjunto de nível $\Omega_\zeta = \{x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq f(x_0) + \zeta\}$ é limitado e que K_1 seja um subconjunto infinito de $K \subset \mathbb{N}$ tal que para todo $k \in K_1$ exista $d_k \in D_k$ tal que existam constantes $c_3 > 0$, $0 < \Delta_{\min} < \Delta_{\max} < \infty$ tais que a condição (2.28) é satisfeita e, além disso,*

$$\|d_k\| \in [\Delta_{\min}, \Delta_{\max}].$$

Então, para qualquer $\varepsilon > 0$, existe $k \in \mathbb{N}$ tal que $\|g_k\| \leq \varepsilon$.

Demonstração: Veja [13]. ■

Terminamos esta seção discutindo nossas intenções com este critério. Primeiramente, estamos interessados em comparar alguns critérios de buscas utilizando o método BFGS, e queremos utilizar este critério nesta comparação. Como os autores sugerem em [13], nos casos onde se tem acesso ao gradiente da função objetivo para o problema (1.1), alguns dos parâmetros do critério podem ser escolhidos levando em conta o gradiente. Escolhendo $\beta_k = \min\{10, \|g(x_k)\|^\tau\}$ para qualquer $\tau > 0$, temos a condição que β_k tende para zero se o gradiente em x_k vai para zero, como exige (4.48). Outra possibilidade, sugerida também em [13], é utilizar $\beta_k = 1$ para todo $k > 0$.

Explicitamos agora o Algoritmo 4.19, para o caso particular em que $D_k = \{-H_k g_k\}$ e que $\tau_{\min} = \tau_{\max} = \sigma$, que tomando um comprimento do passo inicial arbitrário $\bar{\alpha} \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$, com $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, torna-se:

Algoritmo 4.22 Backtracking do critério DMR

Dados um ponto x_k , uma direção $d_k \in \mathbb{R}^n$, $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ e $0 < \sigma < 1$

Defina $\alpha = \bar{\alpha}$

REPITA enquanto $f(x_k + \alpha d_k) > \max_{0 \leq j \leq \min\{M-1, k\}} f(x_{k-j}) + \zeta_k - \alpha^2 \beta_k$

$\alpha = \sigma \alpha$

Defina $\alpha_k = \alpha$

4.12 Critério de Cheng e Li

Nesta seção, apresentamos o critério de busca unidirecional proposto por Cheng e Li [9], que abreviadamente denominaremos critério CL. Ressaltamos que este critério foi proposto para resolver sistemas de equações não lineares

$$F(x) = 0,$$

onde $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é uma aplicação continuamente diferenciável. O critério de busca unidirecional proposto por Cheng e Li foi baseado no critério de Zhang e Hager, discutido na Seção 4.8, e, também, no primeiro critério de busca unidirecional sem derivadas para sistemas de equações não lineares, proposto por Li e Fukushima em [22], que descrevemos a seguir: seja $\{\zeta_k\}$ uma sequência somável e κ uma constante positiva. Dados um ponto x_k e uma direção descida d_k , queremos encontrar um comprimento do passo α_k que satisfaça

$$\|F(x_k + \alpha_k d_k)\| \leq \|F(x_k)\| - \kappa \|\alpha_k d_k\| + \zeta_k \|F(x_k)\|.$$

Notamos que esta regra está bem definida para valores suficientemente pequenos de α_k , pois se α_k tende a zero, temos que

$$\|F(x_k + \alpha_k d_k)\| - \|F(x_k)\| + \kappa \|\alpha_k d_k\| \rightarrow 0,$$

e como $0 \leq \zeta_k \|F(x_k)\|$, temos para α_k suficientemente pequeno, que

$$\|F(x_k + \alpha_k d_k)\| - \|F(x_k)\| + \kappa \|\alpha_k d_k\| \leq \zeta_k \|F(x_k)\|.$$

Consideramos o problema (1.1), onde a função $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é continuamente diferenciável, e sejam $d_k \in \mathbb{R}^n$ direção de descida para f em um dado ponto x_k , $\{\zeta_k\}$ uma sequência positiva somável e $\vartheta \in (0, 1)$. O critério de Cheng e Li consiste em encontrar um comprimento do passo

satisfazendo a seguinte condição

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq C_k + \zeta_k - \vartheta \alpha_k^2 f(x_k), \quad (4.50)$$

onde $C_0 = f(x_0)$ e C_k é atualizado de acordo com a regra

$$C_{k+1} = \frac{\eta_k Q_k (C_k + \zeta_k) + f(x_{k+1})}{Q_{k+1}}, \quad Q_{k+1} = \eta_k Q_k + 1,$$

com $Q_0 = 1$ e $\eta_k \in [0, 1]$.

Notamos que a regra (4.50) está bem definida, pois $\zeta_k > 0$ e $f(x_k) \leq C_k$, de acordo com resultado a seguir.

Lema 4.23 *Seja a sequência $\{x_k\}$ gerada por (1.2) onde d_k é uma direção de descida para f em x_k , α_k é dado pela busca (4.50) com $\zeta_k \in [\zeta_{\min}, \zeta_{\max}] \subset [0, 1]$, então $f(x_k) \leq C_k$, $\forall k \geq 0$. Além disso, a sequência $\{C_k\}$ satisfaz*

$$C_k \leq C_{k-1} + \zeta_{k-1}.$$

Demonstração: Veja [9]. ■

O resultado de convergência para este critério, considerando o sistema não linear $F(x) = 0$ e definindo $f(x) = \frac{1}{2} \|F(x)\|^2$, é apresentado a seguir.

Teorema 4.24 *Seja a sequência $\{x_k\} \in \Omega_\zeta$ definida como no lema anterior, onde*

$$\Omega_\zeta = \left\{ x \in \mathbb{R}^n; f(x) \leq f(x_0) + \zeta \text{ e } \sum_{k=0}^{\infty} \zeta_k < \zeta \right\}$$

e $\zeta_{\max} < 1$. Então todo ponto limite x_ de $\{x_k\}$ satisfaz*

$$F(x_*)^T J(x_*) F(x_*) = 0.$$

onde $J(x_)$ é a matriz Jacobiana de $F(x)$ em x_* .*

Demonstração: Veja [9]. ■

Terminamos esta seção apresentado o processo de busca para o critério de Cheng e Li.

Algoritmo 4.25 Backtracking do critério CL

Dados um ponto x_k , uma direção de descida $d_k \in \mathbb{R}^n$, $0 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max}$, $\bar{\alpha}_k \in [\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ e os parâmetros $\zeta_k > 0$, $0 < \sigma < 1$, $\vartheta \in (0, 1)$

Defina $\alpha = \bar{\alpha}$

REPITA enquanto $f(x_k + \alpha_k d_k) > C_k + \zeta_k - \vartheta \alpha_k^2 f(x_k)$

$$\alpha = \sigma\alpha$$

Defina $\alpha_k = \alpha$ e pare

No Capítulo 5 testamos este critério utilizando a função objetivo do problema (1.1) ao invés da função mérito do sistema de equações.

4.13 Critério de Busca Não Monótona de Shi e Shen

Nesta seção, apresentamos o critério de busca unidirecional não monótona proposto por Shi e Shen [33], que denominaremos abreviadamente por critério **NMSS**.

Dados um ponto $x_k \in \mathbb{R}^n$ e uma direção de busca d_k , consideramos os parâmetros M inteiro não negativo, $\gamma \in (0, \frac{1}{2})$ e $B_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica definida positiva que aproxima a matriz Hessiana de f em x_k . O critério de busca não monótona de Shi e Shen consiste em escolher um comprimento do passo α_k tal que

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \alpha_k \left[g_k^T d_k + \frac{1}{2} \alpha_k d_k^T B_k d_k \right],$$

onde $m(0) = 0$ e $0 \leq m(k) \leq \min\{m(k-1) + 1, M\}$, $k \geq 1$.

O algoritmo a seguir descreve o *backtracking* proposto em [33].

Algoritmo 4.26 Busca do critério **NMSS**

Dados $x_k, d_k \in \mathbb{R}^n$, $\sigma \in (0, 1)$, $\xi \in [0, 2)$ e $B_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica definida positiva

Defina $\alpha = -\frac{\xi g_k^T d_k}{d_k^T B_k d_k}$

REPITA enquanto $f(x_k + \alpha d_k) > \max_{0 \leq j \leq m(k)} f(x_{k-j}) + \gamma \alpha \left[g_k^T d_k + \frac{1}{2} \alpha d_k^T B_k d_k \right]$

Faça $\alpha = \sigma\alpha$

Escolha $\alpha_k = \alpha$

Segundo os autores, o critério acima apresenta duas vantagens quando comparados com a busca não monótona de **GLLAr**. A primeira é que o passo inicial $-\frac{\xi g_k^T d_k}{d_k^T B_k d_k}$ mostrou ser uma escolha razoável e útil nos experimentos numéricos realizados em [33]. Além disso, tomando os mesmos parâmetros e denotando por α_k e α'_k os comprimentos de passo definidos pelas buscas de **GLLAr** e **NMSS**, respectivamente, temos que sempre um comprimento do passo aceito pela busca de **NMSS** será aceito pela busca de **GLLAr**, desta forma

$$\alpha_k \leq \alpha'_k, \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Isto mostra que podemos obter um comprimento do passo maior na busca **NMSS** em relação à busca de **GLLAr**, e como um resultado esperamos ter o número de avaliações de função em cada iteração reduzido.

O resultado de convergência associado a esta busca unidirecional é o seguinte:

Teorema 4.27 *Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciável. Suponhamos que f é limitada inferiormente em \mathbb{R}^n com gradiente ∇f Lipschitz contínuo em um conjunto convexo G que contém o conjunto de nível Ω_0 . Suponhamos ainda que existem constantes $0 < \lambda \leq \Lambda$ tais que, para qualquer k ,*

$$\lambda \|d_k\|^2 \leq d_k^T B_k d_k \leq \Lambda \|d_k\|^2$$

e que d_k satisfaz a condição (2.28). Então

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

Demonstração: Veja [33]. ■

4.14 Critério de Yin e Du

Apresentamos nesta seção o critério de busca unidirecional proposto por Yin e Du em [37], que abreviadamente denominaremos critério YD. A referência [37], ao contrário de todas as outras que introduzem algum critério de busca unidirecional, não apresenta resultados numéricos. Além disso, foi proposto para direções gerada pelo método do BFGS de larga escala, mais precisamente, direções da forma $d_k = -B_k^{-1} g_k$, onde as matrizes B_k , são dadas por

$$B_{k+1} = \rho_k \left[B_k - \frac{B_k p_k p_k^T B_k}{p_k^T B_k p_k} \right] + \frac{q_k q_k^T}{q_k^T p_k}, \quad (4.51)$$

onde $p_k = x_{k+1} - x_k$, $q_k = g_{k+1} - g_k$, e ρ_k é o fator de larga escala que satisfaz

$$\rho_k = \frac{q_k^T p_k}{p_k^T B_k p_k}.$$

Para definir o critério de busca unidirecional proposta por Yin e Du, precisamos da seguinte definição:

Definição 4.28 *A aplicação $\sigma : [0, +\infty) \rightarrow [0, +\infty)$ é chamada de uma função forçante se para qualquer sequência $\{t_i\}$ com $t_i \geq 0$, temos*

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \sigma(t_i) = 0 \Rightarrow \lim_{i \rightarrow \infty} t_i = 0.$$

De posse dessa definição, podemos definir a busca de Yin e Du. *Sejam $x_k \in \mathbb{R}^n$ um ponto e $d_k \in \mathbb{R}^n$ uma direção de busca. Dados os parâmetros $0 < \gamma < 1$, um inteiro não negativo M , e duas funções forçantes σ_1 e σ_2 , o critério de Yin e Du consiste em encontrar um comprimento do passo α_k tal que*

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq \max_{0 \leq j \leq M} f(x_{k-j}) - \gamma \min\{\sigma_1(\mu_k), \sigma_2(v_k)\} \quad (4.52)$$

onde $\mu_k = -\frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|}$ e $v_k = -\alpha_k g_k^T d_k$. Os autores ainda sugerem utilizar esta busca juntamente com desigualdade

$$\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \beta g_k^T d_k,$$

onde $0 < \gamma < \beta < 1$. E além disso, ao invés de utilizar a condição (4.52), é possível utilizar a condição

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq C_k - \gamma \min\{\sigma_1(\mu_k), \sigma_2(v_k)\},$$

onde $\mu_k = -\frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|}$, $v_k = -\alpha_k g_k^T d_k$ e C_k é atualizado iterativamente por $C_0 = f(x_0)$, $Q_0 = 1$, $\eta_k \in [0, 1]$ e

$$C_{k+1} = \frac{\eta_k Q_k C_k + f(x_{k+1})}{Q_{k+1}}, \quad Q_{k+1} = \eta_k Q_k + 1.$$

É interessante observar que esta busca generaliza algumas buscas unidirecionais que vimos do decorrer dos Capítulos 3 e 4. As buscas de Armijo, Wolfe, Grippo, Lampariello e Lucidi, Dai e, Zhang e Hager são algumas das buscas generalizadas, quando tomamos as funções forçantes dadas por $\sigma_1(x) = R$ com $R \geq \sup_k \{-\alpha_{\max} g_k^T d_k\}$ e $\sigma_2(x) = x$. O resultado de convergência apresentado em [37] é reproduzido a seguir.

Teorema 4.29 *Sejam $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função continuamente diferenciável e $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Suponhamos que o conjunto de nível Ω_0 é limitado e que o gradiente da função objetivo é Lipschitz contínuo em alguma vizinhança de Ω_0 . Suponhamos também que as direções d_k são dadas por (4.51) e α é obtido pelas condições (4.52) e (3.4). Se existe uma constante positiva $K \geq 0$ para a qual*

$$\|q_{k+1} - q_k\| \leq (1 - \beta)\|g_k\|$$

para todo $k \geq K$, então

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

Demonstração: Veja [37]. ■

Observação 4.30 *No Capítulo 5 utilizamos o critério de Yin e Du nos testes computacionais. Consideramos a desigualdade (4.52) e as funções forçantes $\sigma(x) = \sqrt{x}$, $\sigma(x) = x$, e $\sigma(x) = x^2$.*

Capítulo 5

RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo, apresentamos resultados numéricos envolvendo as buscas unidirecionais apresentadas nos Capítulos 3 e 4 aplicadas ao método BFGS. Na Seção 5.1, apresentamos o algoritmo que foi utilizado nos testes. A metodologia de comparação dos critérios foi descrita na Seção 5.2. Nas Seções 5.3 e 5.4, apresentamos, respectivamente, como escolhemos os parâmetros utilizados em cada busca unidirecional e os critérios de parada dos testes numéricos. Finalmente, na Seção 5.6 discutimos os resultados das comparações entre os diferentes critérios estudados mediante gráficos de perfil de desempenho na resolução e problemas da coleção de Moré, Garbow e Hillstom [25].

5.1 Algoritmo Utilizado

Nesta seção, apresentamos o Algoritmo Quase Newton que foi utilizado nos testes. Tal algoritmo consiste em uma versão modificada do Algoritmo BFGS 2.47 proposto no Capítulo 2, de modo que as hipóteses direcionais (2.26) e (2.27) sejam satisfeitas em todas as iterações. Além disso, testes são acrescentados para garantir a positividade das matrizes geradas pelo método BFGS. Abaixo, explicitamos o algoritmo utilizado, observamos que n_f representa o número de avaliações de funções e as constantes $k_{\max} > 0$, $\epsilon_x > 0$, $\epsilon > 0$, $n_{f,\max} \in \mathbb{N}$, referem-se aos critérios de parada e serão tratados na Seção 5.4.

Algoritmo 5.1 *Algoritmo BFGS*

Dados $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $n_{f,\max}$, $k_{\max} \in \mathbb{N}$, ϵ , $\epsilon_x > 0$, $0 < c_1 < c_2$, $H_0 = I_{n \times n}$ e $k = 0$

ENQUANTO $\|g_k\|_\infty \geq \epsilon$, $k < k_{\max}$, $n_f < n_{f,\max}$ e $\|x_{k+1} - x_k\|_\infty \geq \epsilon_x$

Defina $d_k = -H_k g_k$

SE $|g_k^T d_k| < c_1 \|g_k\|_\infty^2$ ou $\|d_k\|_\infty > c_2 \|g_k\|_\infty$

$d_k = -g_k$

$H_k = I_{n \times n}$

Obtenha $\alpha_k > 0$ por alguma Busca Unidirecional

Faça $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, $q_k = g_{k+1} - g_k$ e $p_k = x_{k+1} - x_k$

$$\begin{aligned}
& SE \ q_k^T p_k > 0 \\
& H_{k+1} = H_k + \left(1 + \frac{q_k^T H_k q_k}{p_k^T q_k}\right) \frac{p_k p_k^T}{p_k^T q_k} - \frac{p_k q_k^T H_k + H_k q_k p_k^T}{p_k^T q_k}. \\
& \text{CASO CONTRÁRIO} \\
& H_{k+1} = I_{n \times n} \\
& k = k + 1.
\end{aligned}$$

Decorre da Observação 2.46 e do teste $q_k^T p_k > 0$, que sempre estamos utilizando direções de descida d_k para f a partir de x_k . Disto, segue que $g_k^T d_k \leq 0$, e logo a hipótese direcional (2.26) torna-se $|g_k^T d_k| \leq c_1 \|g_k\|_\infty^2$. Isto justifica o teste direcional.

Finalizamos esta seção com observações referentes à notação: chamamos de critério de “x” o Algoritmo BFGS onde o comprimento do passo foi obtido mediante a busca unidirecional “x”, e em tabelas e gráficos utilizamos a abreviação dada na sua respectiva seção dos capítulos anteriores. Por exemplo, chamamos de critério de Armijo o Algoritmo BFGS com a busca unidirecional de Armijo, e em tabelas e gráficos utilizamos a notação **Arm**. Além disso, quando dissemos que o critério “x” obteve tal desempenho queremos dizer que busca unidirecional “x” proporcionou tal desempenho ao algoritmo do método BFGS, isto é, o algoritmo BFGS com a busca unidirecional “x” obteve tal desempenho.

5.2 Metodologia de Comparação

A metodologia que utilizamos para comparar os critérios apresentados nos Capítulos 3 e 4 foi baseada em [6]. Esta referência compara 65 métodos de Lagrangeano Aumentado calibrando os parâmetros de cada um deles. No presente trabalho, queremos comparar 21 tipos de busca, cada um deles com diversas escolhas de parâmetros, totalizando 1352 algoritmos no teste computacional.

Consideramos um problema fixo e seja $x^{(C)}$, $C = 1, 2, \dots, 1352$, a solução encontrada pelo critério C para este problema. Definimos

$$f_{\min} = \min_C \{f(x^{(C)})\}.$$

Dissemos que o critério C encontrou uma solução para o problema se

$$f(x^{(C)}) \leq f_{\min} + 10^{-3}|f_{\min}| + 10^{-6}. \quad (5.1)$$

Em outras palavras, para cada problema, consideramos que um critério obteve sucesso quando encontrou, a menos de uma tolerância, o melhor valor de função entre todos os valores de função encontrados por todos os critérios testados.

Uma medida de eficiência a ser utilizada em nossa análise podia ser o número de avaliações de função. Por exemplo, se dois critérios resolvem um determinado problema, mas o primeiro avaliou a função mais vezes, diríamos que o segundo foi mais rápido. No entanto, enquanto alguns critérios não avaliam o gradiente na busca, outros critérios utilizam várias

avaliações de gradiente em sua busca. Na tentativa de equilibrar a comparação em termos de eficiência, utilizamos a medida de trabalho definida em [20]: soma do número de avaliações de função n_f com o dobro do número de avaliações de gradiente n_g , isto é,

$$T = n_f + 2 n_g. \quad (5.2)$$

Consideramos um problema fixo e seja $T^{(C)}$, $C = 1, 2, \dots, 1352$, o trabalho do critério C aplicado para este problema. Definimos

$$T_{\min} = \min_C \{T^{(C)} \text{ tal que o critério } C \text{ encontrou uma solução}\}. \quad (5.3)$$

Dissemos que o critério C foi o mais eficiente para o problema se

$$T^{(C)} \leq T_{\min} + c T_{\min}, \quad c \in [0, \infty). \quad (5.4)$$

Utilizamos $c = 0.05$ na avaliação dos nossos testes, o que significa que estamos considerando como mais eficientes os algoritmos que ficaram a menos de uma tolerância de 5% do melhor trabalho em um determinado problema fixo.

A referência [6] traz uma comparação semelhante em termos de eficiência em relação ao tempo computacional, com constante $c = 0.01$, mas como nosso banco de problemas é menor que o de [6] e os problemas são de pequena escala, achamos inconveniente considerar a comparação de eficiência em termos do tempo computacional. Além disso, aumentamos a constante c para 0.05, de modo a tornar nosso critério mais representativo uma vez que estamos considerando a medida de trabalho que é um dado discreto e não contínuo como é o tempo computacional.

Observamos que os critérios de parada não decidem se um determinado algoritmo obteve sucesso ou fracasso, eles encerram apenas a execução do algoritmo. Ao compararmos os resultados entre todos os algoritmos para um dado problema é que se decide quais algoritmos obtiveram sucesso no problema em questão. Por exemplo, sejam Algoritmos A e B tais que para um determinado problema o Algoritmo A satisfaz a condição $\|g_k\| < \epsilon$, que geralmente é tratada como sucesso, em um ponto x_A , e o Algoritmo B satisfaz a condição $k \geq k_{\max}$, que geralmente é tratado como fracasso, em um ponto x_B . Suponhamos que $f_{\min} = f(x_B)$ e que $f(x_A) > f_{\min} + 10^{-3}|f_{\min}| + 10^{-6}$, então consideramos, segundo nosso critério de comparação, que o Algoritmo A obteve fracasso e o Algoritmo B obteve sucesso. Essa metodologia é condizente com o nosso objetivo de encontrar o menor valor de função objetivo possível em cada problema.

O teste foi realizado da seguinte forma:

- 1 Para cada um dos 21 critérios, comparamos a robustez e eficiência em termos de trabalho com todas as variações de parâmetros apresentados na Seção 5.3. A robustez de um algoritmo refere-se à quantidade de problemas por ele resolvidos. A eficiência em termos de trabalho refere-se à quantidade de avaliações de função e de gradiente utilizada pelo

algoritmo para resolver os problemas. Quanto maior a quantidade de problemas resolvidos, mais robusto é o algoritmo, e quanto menor a quantidade de avaliações de função e gradiente utilizadas, mais eficiente é o algoritmo.

- 2 Elegemos uma configuração de parâmetros que melhor represente cada critério nos quesitos robustez e eficiência em termos de trabalho.
- 3 Comparamos os representantes de cada critério nos quesitos robustez e eficiência em termos de trabalho.

5.3 Escolha dos Parâmetros

Nesta seção, revisamos os parâmetros necessários a cada algoritmo de busca unidirecional e listamos quais foram os valores testados. Utilizamos os parâmetros que são referenciados nos artigos bases e, em certos casos, sugerimos alguns parâmetros. Os parâmetros utilizados no teste computacional foram:

- $\sigma \in \{0.5, 0.618, 0.87\}$. Estes valores podem ser encontrados, respectivamente, nas referências [21, 39], [33] e [34].
- $\sigma_a = 2$, sugestão dada em [29].
- $\sigma_d = 0.5$, sugerido em [29] (no método da bissecção).
- $\gamma \in \{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-1}, 0.38\}$. Os valores $10^{-4}, 10^{-3}, 0.38$ podem ser, respectivamente, encontrados na referências [9, 11, 29], [21, 39] e [33]. O parâmetro 0.1 foi sugerido pelo autor do presente trabalho, e foi escolhido de forma a ser um parâmetro mediano entre os parâmetros 10^{-3} e 0.38 que são referenciados.
- O parâmetro $\beta = 0.9$ está sugerido em [11, 29, 38].
- $\rho \in \{1 - \gamma ; \gamma = 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-1}, 0.38\}$ foi uma sugestão dada em [29].
- $\mu \in \{1, 1.5\}$. As sugestões são dadas em [34].
- $\nu \in \{10^{-8}, 10^{-4}\}$. A sugestão 10^{-8} foi dada na referência base do critério [39], já o valor 10^{-4} foi sugerido pelo autor do presente trabalho, para mostrar a relevância do termo quadrático do critério em que o parâmetro ν é utilizado, pois acreditamos que o parâmetro 10^{-8} praticamente transforma o critério ZZL na busca unidirecional de Armijo.
- $\{L_k\} \in \left\{ \left\{ \frac{\|g_k - g_{k-1}\|}{\|x_k - x_{k-1}\|^2} \right\}, \left\{ \frac{(x_k - x_{k-1})^T (g_k - g_{k-1})}{\|x_k - x_{k-1}\|^2} \right\}, \left\{ \frac{\|g_k - g_{k-1}\|^2}{(x_k - x_{k-1})^T (g_k - g_{k-1})} \right\} \right\}$, sugestões para esta sequência podem ser encontrados na referência [34].
- $M \in \{1, 3, 5, 10\}$. Todas estas sugestões foram testadas no artigo precursor deste parâmetro, [21], além de também serem citadas em [9, 11, 13, 38, 39].

- $N \in \{1, 2, 5\}$. Sugestões retiradas do artigo [21].
- $\{\eta_k\} = \{0.85\}$. Esta escolha foi a mais eficaz nas comparações numéricas dos trabalhos [38, 39].
- $\{\zeta_k\} \in \left\{ \{1.1^{-k}\}, \left\{ \frac{\|\nabla f(x_0)\|}{(1+k)^2} \right\}, \left\{ \frac{|f(x_0)|}{(k+1)^{1.1}} \right\}, \left\{ \frac{\|\nabla f(x_0)\|}{(1+k)^{1.1}} \right\} \right\}$, sugestões que podem ser encontradas em [9, 13].
- $\{\beta_k\} \in \{\{\min\{10, \|g_k\|^\tau\}\}; \tau = 0, 1, 2\}$, sugestão que pode ser encontrada em [13] para $\tau > 0$ arbitrário, de modo que fixamos alguns valores.
- $\xi = 1$, sugestão dada em [33].
- $\vartheta \in \{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-1}, 0.38\}$. O parâmetro 10^{-4} pode ser encontrado na referência [9]. As demais são baseadas no parâmetro γ , pois o parâmetro ϑ foi relacionado ao parâmetro γ .
- $\sigma_1(x) = x^\tau$ e $\sigma_2(x) = x^\tau$ para $\tau = 0.5, 1, 2$. O parâmetro não possui referências no artigo teórico [37]. Testamos com funções forçantes simples de acordo com a Observação 4.30.

Como dito na Seção 5.2, comparamos 21 critérios sendo que cada um deles requer diferentes combinações de parâmetros. Na Tabela 5.1, apresentamos a quantidade de parâmetros utilizados e a última coluna desta tabela contém o número de versões diferentes testadas para cada critério.

Critério	Seção	σ	σ_a	σ_d	γ	β	ρ	μ	ν	L_k	M	N	η	$\{\zeta_k\}$	$\{\beta_k\}$	ϑ	ξ	$\sigma_1(x)$	$\sigma_2(x)$	Qtde
Puro	3.1																			1
DecS	3.2	3																		3
Arm	3.3	3			4															12
Wolf	3.4		1	1	4	1														4
WolfF	3.5		1	1	4	1														4
Gold	3.6		1	1	4		4													16
SS	3.7	3			4			2		3										72
ZZL	3.8	3			4				2											24
GLLAr	4.2	3			4						4	3								144
GLLW	4.3		1	1	4	1					4	3								48
GLLG	4.4		1	1	4		4				4	3								192
DaiAr	4.5	3			4						4									48
DaiW	4.6		1	1	4	1					4									16
DaiG	4.7		1	1	4		4				4									64
ZHAr	4.8	3			4								1							12
ZHW	4.9		1	1	4	1							1							4
ZHG	4.10		1	1	4		4						1							16
DMR	4.11	3									4			4	3					144
CL	4.12	3											1	4		4				48
NMSS	4.13	3			4						4						1			48
YD	4.14	3			4						4							3	3	432
TOTAL																				1352

Tabela 5.1: Parâmetros por critério.

Em cada critério de busca unidirecional, utilizamos todas as combinações de parâmetros possíveis, o que gera total de 1352 versões do método BFGS comparadas no teste computacional. Denominaremos de Estratégia i , $i = 1, \dots, 1352$ o algoritmo BFGS onde foram utilizadas uma busca unidirecional e uma combinação de parâmetros referente a esta busca. Respeitamos a ordem da Tabela 5.1. Por exemplo, as estratégias 2, 3 e 4 são referentes ao método BFGS

utilizando o critério de decréscimo simples e parâmetros, respectivamente, iguais a $\sigma = 0,5$, $\sigma = 0,618$ e $\sigma = 0,87$. Nos resultados que apresentamos na Seção 5.6 indicamos as melhores estratégias em cada análise e nas tabelas A.1 e A.2 (que se encontram no Apêndice A) podemos observar, respectivamente, a combinação de parâmetros utilizada no método BFGS e os resultados individuais de cada estratégia.

Agora, apresentamos algumas particularidades de alguns critérios. Nos critérios **GLLAr**, **GLLW**, **GLLG**, **DaiAr**, **DaiW** e **DaiG** utilizamos $m(k) = M$ para todo $k \in \mathbb{N}$ conforme sugerido nas referências bases destes critérios [11, 21, 38]. Nos critérios **ZHAr**, **ZHW** e **ZHG**, o artigo de referência [38] testa todos os valores de função anteriores com peso igual ($\{\eta_k\}$ constante), assim procedemos da mesma forma. O critério **NMSS** utiliza uma aproximação da matriz Hessiana na busca unidirecional, por essa razão calculamos as matrizes $B_k = H_k^{-1}$, pela fórmula (2.15) do Capítulo 2. No critério **SS** utilizamos as estimativas (3.20), (3.21) e (3.22) para o parâmetro L_k .

5.4 Critérios de Parada e Parâmetros do BFGS

Os critérios de parada que foram utilizados no teste se dividem em dois grupos: os que interrompem a busca unidirecional e os que interrompem o algoritmo BFGS. A execução do algoritmo, na busca unidirecional, foi interrompido se

- o número de iterações excede $k_{i,\max} = 5000$,
- o comprimento do passo seja superior a $\alpha_{\max} = 5000$,
- a falta de progresso do passo foi inferior a $\epsilon_x = 10^{-15}$, isto é, $|\alpha_c - \alpha_{c-1}| \leq 10^{-15}$, onde α_c e α_{c-1} são, respectivamente, o comprimento do passo corrente e o comprimento do passo anterior ao passo corrente.

A execução do algoritmo, no método BFGS, foi interrompido se

- o número de iterações excede $k_{\max} = 5000$,
- o número de avaliações de função ultrapassa o valor de $n_{f,\max} = 100000$,
- a solução numérica apresenta erro menor ou igual a $\epsilon = 10^{-6}$, isto é, $\|g_k\|_{\infty} \leq \epsilon = 10^{-6}$,
- a falta de progresso foi inferior a $\epsilon_x = 10^{-6}$, isto é, se $\|x_{k+1} - x_k\|_{\infty} \leq 10^{-6}$.

As constantes utilizadas no Algoritmo 5.1 foram $c_1 = 10^{-5}$ e $c_2 = 10^5$, como sugerido em [11, 21].

5.5 Banco de funções

As funções que testamos neste trabalho foram retiradas da coleção organizada por Moré, Garbow e Hillstorn na referência [25]. As 35 funções desta coleção têm a característica comum

de serem somas de quadrados, isto é, são funções da forma

$$\begin{aligned} f: \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto f(x) = \sum_{i=1}^m f_i(x)^2 \end{aligned}$$

onde n , m e $f_i(x)$ para $i = 1, 2, \dots, m$ são definidos para cada função. Existem várias funções, porém, em que os parâmetros n e m são arbitrários. Para definir estes parâmetros no teste, utilizamos o seguinte critério: *Escolhemos n e m tais que a solução está presente no artigo [25] e ainda, para cada problema onde o parâmetro n é variável, escolhemos $n = 20$ e $n = 100$ e tomamos m de modo a satisfazer a regra do problema, caso o parâmetro m também seja variável tomamos $m = n$.* Procedendo dessa forma, cada uma das 1352 estratégias foi testada em um banco de 62 funções.

5.6 Resultados numéricos

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos para os 21 critérios apresentados nos Capítulos 3 e 4. Iniciamos escolhendo as combinações dos parâmetros representantes para cada critério, explicitando algumas relações de dependências de parâmetros nos quesitos de robustez e de eficiência em termos de trabalho (5.2). Na sequência, comparamos os resultados das combinações mais robustas entre os critério e, também, analisamos entre os critérios as combinações mais eficientes. Fazemos, além disso, comparações entre os critérios que não utilizam derivadas.

Os testes computacionais foram realizados em Matlab versão 7.9.0(R2009b), em um computador Intel(R) Core(TM) i2-2100 CPU @ 3.10GHz, com frequência de 3.1GHz e memória de 4GB, e com sistema operacional Windows 7 Ultimate.

5.6.1 Escolha dos Critérios Robustos

Analisamos, primeiramente, as combinações mais robustas de cada critério de busca unidirecional. A Tabela 5.2 apresenta na coluna “Problemas Resolvidos” a porcentagem dos problemas para os quais o critério obteve sucesso de acordo com a condição (5.1). Desejamos escolher a melhor combinação de parâmetros de cada critério, assim, na coluna estratégia indicamos a(s) estratégia(s) que correspondem a porcentagem apresentada, sendo que as demais estratégias apresentaram desempenho inferior aos listados. Lembramos que cada estratégia representa o Algoritmo BFGS com uma busca unidirecional e uma combinação de parâmetros específica. Em negrito, está selecionada a estratégia que apresentou a maior eficiência entre os listados. Observamos que nos critérios **Gold**, **GLLW**, **GLLG**, **DaiW**, **DaiG**, **ZHG** e **YD** obtivemos empates em termos de melhor eficiência. Nessas situações, escolhemos arbitrariamente um deles para representar o critério nas seções seguintes. Lembramos que as combinações de parâmetros, bem

como os resultados obtidos por cada combinação, podem ser encontrados, respectivamente, nas tabelas A.1 e A.2 no apêndice.

Posição	Critério	Problemas Resolvidos	Estratégia
1	Arm	87.1%	8, 12, 16
1	Wolf	87.1%	20
1	Gold	87.1%	28, 32, 36
1	ZZL	87.1%	119, 120, 127, 128, 135, 136
1	GLLAr	87.1%	173, 174, 175, 178, 181, 221, 222, 223, 226, 229, 270, 271, 274, 277
1	GLLG	87.1%	366, 414
1	DaiG	87.1%	597, 613
8	WolfF	85.5%	24
8	GLLW	85.5%	317, 318, 319, 321, 322, 325, 328
8	DaiW	85.5%	581, 582, 583, 584
8	NMSS	85.5%	837
12	ZHW	83.9%	664
13	ZHAr	82.3%	652, 656
13	ZHG	82.3%	668, 672
15	YD	80.6%	1012, 1013, 1157
16	DecS	77.4%	2, 3, 4
17	DaiAr	74.2%	521
18	SS	69.4%	59
19	CL	67.7%	1333
20	DMR	61.3%	683
21	Puro	14.5%	1

Tabela 5.2: Melhores resultados em termos de robustez.

Chamamos a atenção na Tabela 5.2 para a quantidade de empates. Acreditamos que a justificativa reside na ampla gama de parâmetros testados, que tentou extrair o melhor que cada critério poderia oferecer, na robustez do método BFGS e na quantidade relativamente pequena de problemas testados. Notamos que cada problema resolvido representa aproximadamente um incremento de 1.6% na robustez. Assim, a diferença dos critérios mais robustos para os critérios na segunda colocação foi de apenas um problema. Os critérios vencedores resolveram 54 problemas dos 62 testados, porém existe uma diferença entre estes critérios. O critério de **Wolf** resolveu 87,1% dos problemas com apenas uma combinação de parâmetros, enquanto, os critério **GLLG**, **DaiG** com duas, os critérios **Arm** e **Gold** com três, e os critérios **ZZL** e **GLLAr** alcançaram este percentual com várias combinações de parâmetros, assim podemos suspeitar que estes dependem menos da escolha dos parâmetros.

O critério **Arm** proporcionou maior robustez com o parâmetro $\gamma = 0.38$, e podemos ver que as variações da constante de *backtracking* σ não influenciou no desempenho de robustez do algoritmo BFGS com busca de Armijo, porém com o parâmetro $\sigma = 0.5$ o critério proporcionou maior eficiência. O parâmetro $\gamma = 0.38$ também foi fundamental para o critério **ZZL**, que obteve bom desempenho com os demais parâmetros testados. A versão de parâmetros mais eficiente para o critério de Armijo, conta com $\sigma = 0,5$ e $\gamma = 0.38$. Estes parâmetros, juntamente com $\nu = 10^{-8}$, são a combinação mais eficiente para o critério **ZZL**.

O critério **Wolf** mais robusto consiste da versão com a combinação de parâmetros formados por $\sigma_d = 0.5$, $\sigma_a = 2$, $\gamma = 0.38$ e $\beta = 0.9$. Já o critério de **Gold** possui uma certa dependência dos parâmetros $\sigma_d = 0.5$, $\sigma_a = 2$, $\gamma = 0.38$, não dependendo muito de ρ . A

combinação mais eficiente do critério **Gold** se apresentou com $\rho = 0.9999$.

Quanto ao critério **GLLAr**, notamos que as versões que obtiveram maior robustez utilizaram $\gamma = 0.38$ e valores de M e N que permitem uma busca mais monótona, isto é, $M = 1$ ou $M = 2$ e variações de N , ou ainda $M = 5$ e $N = 5$. Lembramos que quanto menor o valor de M e maior o valor de N implica em um algoritmo se torna mais monótono. A versão com a combinação com $\sigma = 0.5$, $\gamma = 0.38$, $M = 1$ e $N = 1$ foi a mais eficiente. Analogamente, os critérios **GLLG** e **DaiG** também têm como parâmetros mais robustos os valores de M e N que tornam os algoritmos mais monótonos. A combinação mais eficiente do critério **GLLG** é a versão com os parâmetros $\gamma = 0.38$, $\rho = 0.9999$, $M = 1$ e $N = 2$, enquanto a do critério **DaiG** é com $\gamma = 0.38$, $\rho = 0.9999$ e $M = 1$.

Os critérios de **WolfF**, **GLLW**, **DaiW** e **NMSS** resolveram um problema a menos que os critérios vencedores. O que chama a atenção que o critério de Wolfe Forte perdeu para o de Wolfe. Acreditamos que a tentativa de fortalecer as condições de Wolfe, acaba tornando o processo de encontrar um comprimento do passo mais difícil. Na sequência aparecem os critérios de **ZHW**, **ZHAr**, **ZHG**, **YD** e **DecS** resolvendo, respectivamente, 83.9%, 82.3%, 82.3%, 80.6% e 77.4% dos problemas. Os demais critérios resolveram menos problemas que o decréscimo simples que não possui teoria de convergência, mas que na prática é facilmente testado. O desempenho destes critérios podem ser observados na Tabela A.2.

5.6.2 Escolha dos Critérios Eficientes

Analisamos o desempenho dos critérios quanto à eficiência medida em trabalho, seguindo o que foi descrito na Seção 5.2. A Tabela 5.3 contém na coluna “Eficiência” o percentual os problemas em que a melhor combinação de parâmetros do critério foi a mais eficiente em relação à medida de trabalho. Em negrito, está selecionada estratégia entre as mais eficientes de um critério fixo que obteve maior robustez. Observamos que os critérios **GLLW**, **DaiW**, **DMR** e **CL** obtiveram empates em termos de melhor robustez entre as combinações mais eficientes, nessas situações escolhemos uma combinação arbitrária para representar o critério.

Os critérios campeões em eficiência em termos de trabalho foram os critérios **Arm** e **ZZL**. O algoritmo com as combinação de parâmetros $\sigma = 0.5$ e $\gamma = 0.38$ para o critério de Armijo e $\sigma = 0.5$ e $\gamma = 0.38$ com $\nu = 10^{-8}$ são as versões mais eficiente no teste. Estas versões obtiveram o melhor trabalho em 12 problemas, o que é bastante significativo, pois estamos comparando 1352 combinações de parâmetros com apenas 62 problemas. Notamos que estas combinações praticamente representam o mesmo critério, já que $\nu = 10^{-8}$ torna o termo quadrático do critério **ZZL** quase nulo. Na sequência aparecem os critérios **NMSS**, **YD**, **GLLAr**. A melhor combinação de parâmetros para o critério **NMSS** foi com $\sigma = 0.5$, $\gamma = 0.38$, $M = 1$ e $\xi = 1$, para o critério **YD** foi com $\sigma = 0.5$, $\gamma = 0.38$, $M = 1$, $\sigma_1(x) = x$ e $\sigma_2(x) = x^2$ e para o critério **GLLAr** as versões com $\sigma = 0.5$, $\gamma = 10^{-1}$, $M = 1$ e $N = 1$ ou $N = 2$, sendo com $N = 2$ a versão mais robusta. Em seguida, aparecem o critério **Puro**, eficiente em 11.3% dos problemas, e critério **DecS**, com melhor trabalho em 7 problemas. Os demais desempenhos em termos de eficiência medida em

Posição	Critério	Eficiência	Estratégia
1	Arm	19.4%	8
1	ZZL	19.4%	119
3	NMSS	17.7%	837
4	YD	16.1%	986
5	GLLAr	12.9%	161, 162
6	Puro	11.3%	1
7	DecS	9.7%	2
8	Gold	8.1%	39
9	GLLG	6.5%	497 - 499, 505, 514 , 517, 520
9	ZHAr	6.5%	649, 650, 651
9	CL	6.5%	1313 , 1317, 1818
12	ZHG	4.8%	680
12	DMR	4.8%	694, 695, 706, 707 , 718
14	SS	3.2%	53 , 61, 63
14	DaiG	3.2%	647
16	DaiAr	1.6%	522, 523, 524, 526, 527, 528, 530, 531, 532, 534 535, 536 , 549, 550, 551
17	Wolf	0%	17 - 19, 20
17	WolfF	0%	21 - 23, 24
17	GLLW	0%	281 - 316, 317 , 318 - 328
17	DaiW	0%	569 - 580, 581 , 582 - 584
17	ZHW	0%	661 - 663, 664

Tabela 5.3: Resultado de eficiência em termos de trabalho.

trabalho podem ser encontrados na Tabela 5.3.

Destacamos, por fim, que as estratégias 8 (**Arm**), 119 (**ZZL**), 837(**YD**) são ao mesmo tempo as mais eficientes e mais robustas dos seus respectivos critérios.

A partir de agora, realizamos a comparação mediante gráficos de perfis de desempenho proposto por Dolan e Moré [14]. Comparamos os critérios mais robustos em termos de eficiência, e vice versa. Para representar os critérios, utilizamos as estratégias em negrito nas Tabelas 5.2 e 5.3.

5.6.3 Eficiência entre os critérios robustos

Começamos explorando os resultados de eficiência dos 5 critérios monótonos mais robustos que o critério **DecS**. Na sequência, comparamos os 10 critérios não monótonos que foram superiores ao critério **DecS** em robustez. Nos gráficos das Figuras 5.1 e 5.2, comparamos, respectivamente, os critério de buscas monótonas e não monótonas melhores que critério **DecS**, devido ao fato de que a adoção de buscas direcionais visa exatamente melhorar o índice de convergência que teríamos exigindo apenas decréscimo simples.

Sabemos que os critérios **Arm**, **Wolf**, **Gold**, e **ZZL** foram igualmente robustos atingindo 87.1% dos problemas. O Gráfico 5.1a permitiu desempatar de certa forma estes critérios. O critério **Gold** necessitou de aproximadamente 3.1 vezes o melhor trabalho para resolver 54 problemas, enquanto os critérios **Arm** e **ZZL** levaram aproximadamente 5 vezes e o critério **Wolf** levou aproximadamente 18 vezes, provavelmente porque este critério utiliza avaliações de gradiente. Notamos que os gráficos de **Arm** e **ZZL** são praticamente iguais, mas que gráfico do critério **Arm**, no geral, está acima do gráfico do critério **ZZL**. Acreditamos que isto decorre da constante $\nu = 10^{-8}$ que praticamente anula o termo quadrático na condição (3.8). Podemos

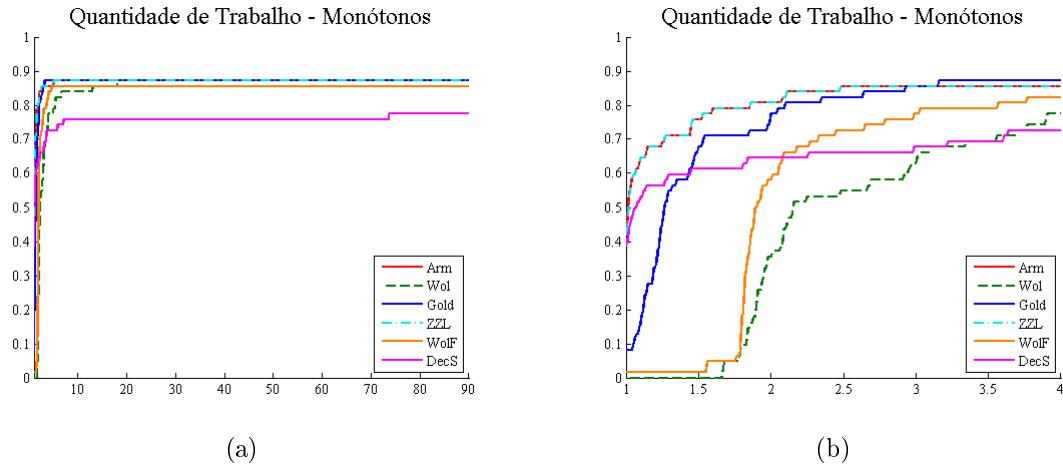


Figura 5.1: Perfis de Desempenho - Critérios de buscas monótonas mais robustos.

considerar que o critério **Arm** foi melhor que o critério **ZZL**. Na sequência aparece o critério de **WolF** que necessita de aproximadamente 4.6 vezes o melhor trabalho para resolver 85.5% dos problemas. Finalmente, apareceu o **DecS**, que necessita de 7 vezes o melhor trabalho para resolver 77.4% dos problemas. O Gráfico 5.1b, zoom do Gráfico 5.1a, revela que os mais eficientes nesta análise são, respectivamente, o critério **Arm** com 43.5%, **ZZL** com 41.9% e **DecS** com 38.7% em terceiro. O critério de **Gold** é mais eficiente em 8% dos problemas e o critério **WolF** foi o melhor em 1 problema.

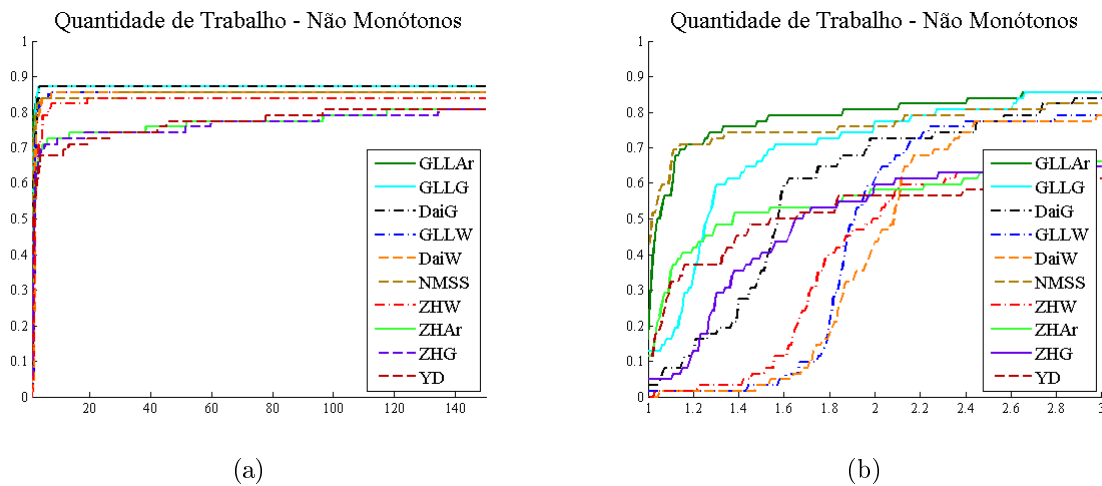


Figura 5.2: Perfis de Desempenho - Critérios de buscas não monótonas mais robustos.

Uma análise semelhante à dos gráficos da Figura 5.1 foi feita considerando apenas os critérios de buscas não monótonas. Como sabemos, os algoritmos não monótonos do Gráfico 5.2a têm robustez de 87.1%, 85.5%, 83.9% e 82.3%. A marca de 87.1% foi atingida primeiro pelo critério **GLLAr** que utilizou 3 vezes a melhor marca, seguido pelos critérios **GLLG**, e **DaiG** que utilizam, respectivamente, 3.2 e 3.3 vezes o melhor trabalho. O critério **GLLW** é o primeiro a atingir 85.5% dos problemas, dentre os que atingiram, no máximo, esse nível, seguido por **DaiW** e **NMSS**, respectivamente. No Gráfico 5.2b podemos observar quais são os critérios mais efí-

entes entre os mais robustos não monótonos. O critério **NMSS** foi o mais eficiente em 42% dos problemas quando comparamos apenas os não monótonos. Em seguida apareceram os critério **GLLAR** com 16.1%, **GLLG** com 12,9%, **YD** e **ZHAr** com 11.3%, **ZHG** com 4.8% e **DaiG** com 3.2%.

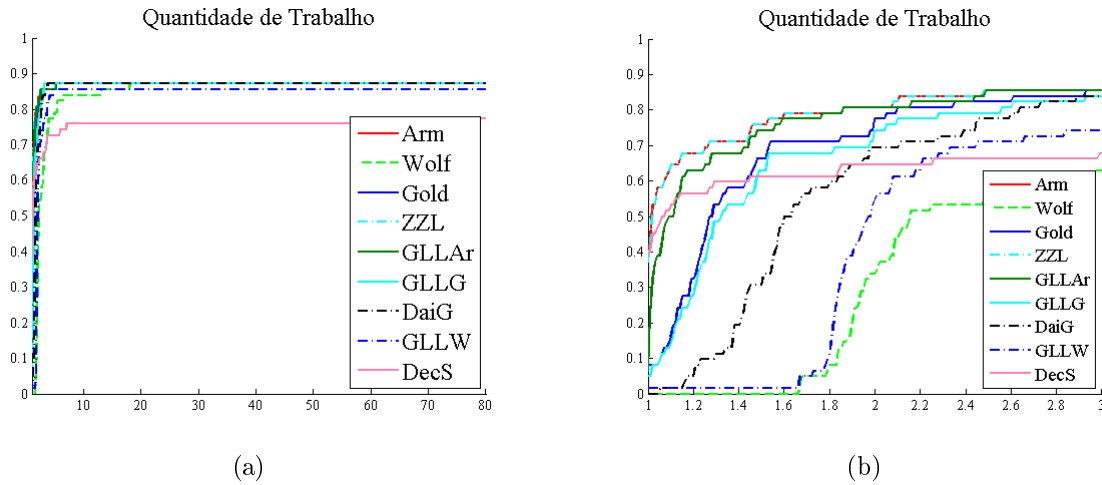


Figura 5.3: Perfis de Desempenho - Critérios mais robustos.

Finalmente, os gráficos da Figura 5.3 apresentam os quatro algoritmos monótonos mais robustos e os quatro não monótonos mais robustos, além do desempenho do critério **DecS**. O Gráfico 5.3a apresenta a robustez. Como sabemos, vários critérios foram os mais robustos. Apresentamos agora a ordem em que os critérios atingiram a robustez de 87.1%. O critério **GLLAR** foi o primeiro levando 3 vezes o melhor trabalho para resolver 54 problemas. Os critérios de **Gold** e **GLLG** necessitam de 3.2 vezes o melhor trabalho para chegar a essa meta, seguidos pelo critério **DaiG**, que com 3.8 vezes o melhor trabalho atinge a robustez de 87.1%. Na sequência, com 5 vezes o melhor trabalho os critérios de **Arm** e **ZZL** resolveram 87.1 % dos problemas. No Gráfico 5.3b, podemos ver a eficiência dos critérios mais robustos. Os critérios **Arm** e **DecS** foram eficientes em 37.8% dos problemas, seguido pelos critérios **ZZL** com 37.1%, **Gold** com 8%, **GLLAR** com 6.3%, **GLLG** com 4.8% e **GLLW** com 1.6%. Observamos que esses resultados mostram que o critério **GLLAR** foi o melhor seguido pelos critérios baseados na busca de Goldstein, isto é, **Gold**, **GLLG** e **DaiG**. Porém, em termos de eficiência, podemos destacar os critérios de buscas monótonas **Arm**, **ZZL** e **DecS**.

5.6.4 Robustez entre os critérios mais eficientes

Nos gráficos 5.4 consideramos todos os critérios mais eficientes que o critério **DecS**. Como justificamos anteriormente, o critério **DecS** geralmente não é utilizado por não possuir garantias de convergência e pretendemos analisar buscas unidirecionais superiores ao critério **DecS**. Em termos de robustez, Gráfico 5.4a, os critérios mais robustos entre os mais eficientes foram **Arm** e **ZZL**, que resolveram 87.1% os problemas em aproximadamente 5.2 vezes o melhor trabalho. Na sequência apareceram os critérios **NMSS**, **GLLAR**, **DecS** e **YD**, os quais resolveram 85.5%, 82.3%, 77.4% e 74.2% dos problemas, respectivamente. No gráfico de perfil de desempenho 5.4b, que

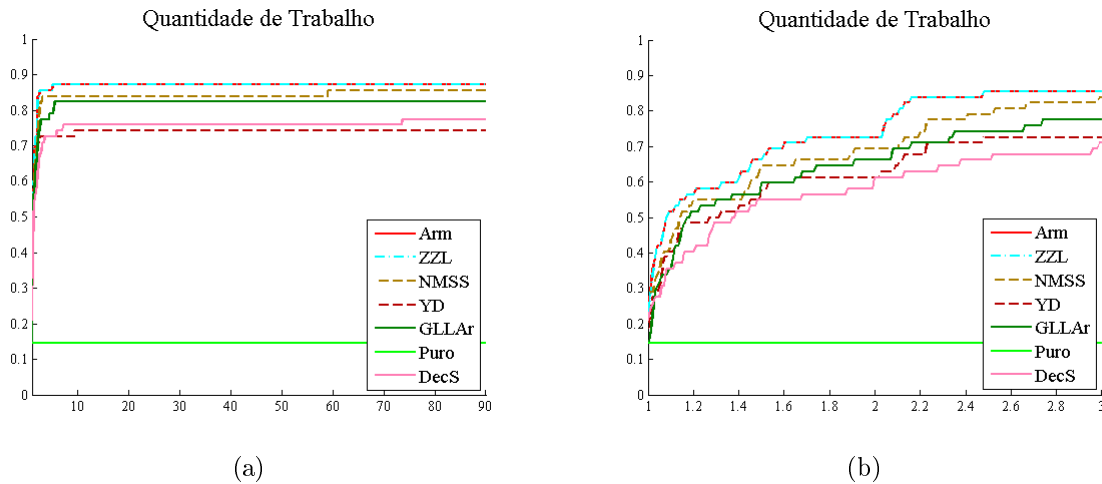


Figura 5.4: Perfis de Desempenho - Critérios mais eficientes em termos de trabalho.

é um zoom de 5.4a, podemos perceber, que entre os critérios mais eficientes, temos a seguinte sequência de eficiência: NMSS com 27.4%, Arm com 24.2%, ZZL com 22.6%, DecS com 21%, YD com 17.7% e GLLAr e Puro com 14.5%.

5.6.5 Os critérios sem derivadas

Comparamos aqui os critérios que não utilizam derivadas, ou seja, os critérios Puro, DecS, DMR e CL. Lembramos que os dois primeiros não possuem teoria de convergência, e que estamos usando avaliações de gradiente no método do BFGS.

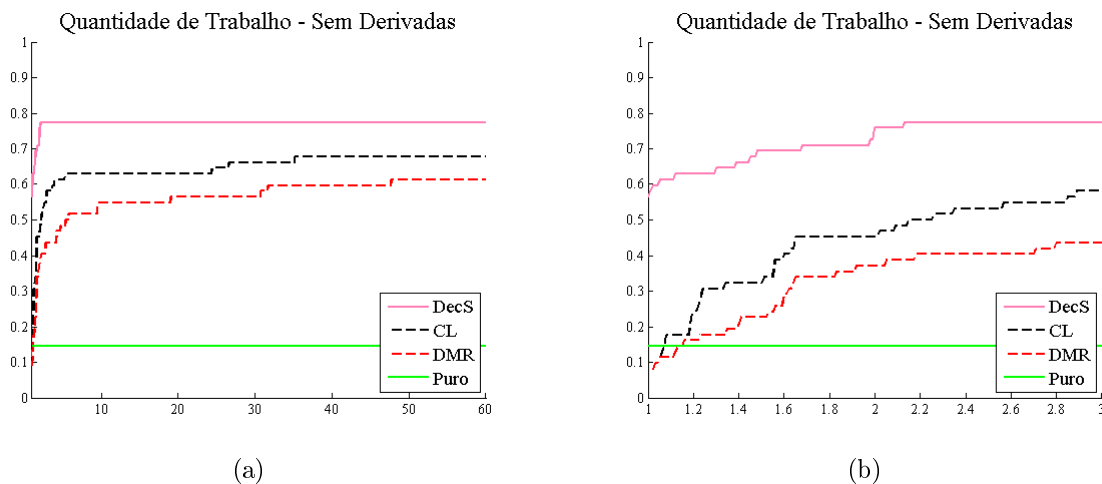


Figura 5.5: Perfis de Desempenho - Critérios sem derivadas mais robustos.

Nos gráficos da Figura 5.5 comparamos os critérios sem derivadas da Tabela 5.2. Em 56.5% dos problemas o critério DecS foi o mais eficiente. O critério Puro resolveu 14.5% dos problemas com o melhor trabalho, enquanto os critérios CL e DMR foram eficientes em 8% dos problemas. Já em termos de robustez, o critério DecS levou 2.1 vezes o melhor trabalho para atingir 77.4% de robustez, seguido pelos critérios CL e DMR, que levaram 35.3 e 48.8 vezes

o melhor trabalho para atingir 67.7% e 61.3% de robustez. O menos robusto foi o critério **Puro** que resolveu 14.5% dos problemas.

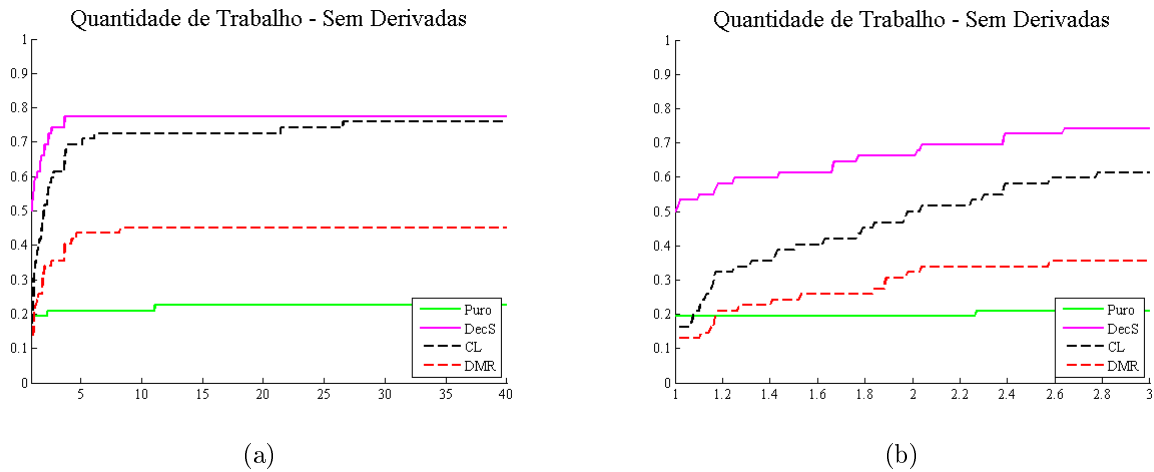


Figura 5.6: Perfis de Desempenho - Critérios sem derivadas mais eficientes em termos de trabalho.

Nos gráficos da Figura 5.6 comparamos os critérios sem derivadas apresentados na Tabela 5.3. Entre os mais eficientes o critério **DecS** foi o mais robusto com 77.4% dos problemas resolvidos, além disso atingiu essa marca em 2.1 vezes o melhor trabalho. Na sequência apareceram o critério **CL**, que atingiu 64.5% de robustez em 21.3 vezes o melhor trabalho, e o critério **DMR**, que atingiu a robustez de 32.3% em 6.5 vezes o melhor tempo. O critério sem derivadas menos robusto foi o **Puro**, com 14.5%. Os critérios **DecS**, **Puro**, **CL** e **DMR**, proporcionaram ao método BFGS a eficiência de 59.7%, 14.5%, 14.5% e 6.5%, respectivamente, como pode ser observado no Gráfico 5.6b.

5.6.6 Proposta de uma nova comparação

A quantidade de algoritmos comparados influencia diretamente nas medidas de eficiência, no sentido que se a quantidade de algoritmos for muito grande a eficiência de cada algoritmo comparado é pequena ou nula. Além disso, a quantidade baixa de problemas faz com que haja muitos empates em termos de robustez. Por estas razões elaboramos outra metodologia para análise.

Tomando um problema fixo i . Seja $T_i^{(C)}$, $C = 1, 2, \dots, n_a$ o trabalho final do algoritmo que utiliza o critério C aplicado para este problema fixo, onde n_a é o número de algoritmos que se pretende comparar. Consideramos apenas os trabalhos dos algoritmos que obtiveram sucesso segundo (5.1) e T_i^{\min} como em (5.3). Para cada critério atribuímos um número entre 0 e 1, dado por

$$\Gamma_i^{(C)} = \frac{T_i^{\min}}{T_i^{(C)}},$$

onde $T_i^{(C)}$ é o trabalho utilizado pelo critério C para resolver o problema i . E se o critério C não obteve sucesso segundo (5.1), atribuímos $\Gamma_i^{(C)} = 0$. A medida de eficiência de trabalho segundo nossa sugestão para cada critério C será dada pela soma

$$\Gamma^{(C)} = \frac{100}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p} \Gamma_i^{(C)}$$

onde n_p é o número de problemas. Notamos que $\Gamma_i^{\text{melhor}} = 1$ quando o critério C possui o melhor trabalho para o problema i e que quanto pior for a solução encontrada pelo critério C para o problema i é menor o valor de $\Gamma_i^{(C)}$. Sendo assim, o critério como maior eficiência de trabalho é o critério com maior valor de $\Gamma^{(C)}$.

O valor $\Gamma^{(C)}$ representa o desempenho percentual do critério C em termos de eficiência. Notamos que, o critério que obter o menor trabalho em todos os problemas terá um desempenho de 100%, enquanto se ele não resolver nenhum problema terá o desempenho de 0%.

Como argumento dessa sugestão apresentamos o seguinte exemplo.

Exemplo 5.2 Consideramos três Algoritmos A , B e C e 4 problemas. Suponhamos que a quantidade de trabalho é dada pela seguinte Tabela 5.4.

	Prob.1	Prob.2	Prob.3	Prob.4
Alg.A	10	10	100	100
Alg.B	100	100	10	10
Alg.C	11	11	11	11

Tabela 5.4: Trabalho dos algoritmos por problema.

Notamos que segundo o critério (5.4), aceitamos como os algoritmos eficientes nesses problemas os critérios que apresentam trabalho inferior a $10 + 0.05 \cdot 10 = 10,5$. Portanto dessa forma, temos a seguinte tabela de eficiência.

Algoritmo	Eficiência
Alg. A	50%
Alg. B	50%
Alg. C	0%

Tabela 5.5: Eficiência em termos de trabalho.

Porém, é claro que, ao analisar a Tabela 5.4, o Algoritmo C não foi tão inferior aos Algoritmos A e B . A nossa proposta visa diminuir essa discrepância de resultados, como podemos visualizar na Tabela 5.6.

Algoritmo	Desempenho
Alg. A	55%
Alg. B	55%
Alg. C	90.9%

Tabela 5.6: Desempenho.

Assim, na nossa nova comparação, o algoritmo mais eficiente foi o Algoritmo C .

Posição	Critério	Desempenho	Estratégia
1	Arm	61.5%	8
2	ZZL	61.4%	119
3	GLLAr	58.8%	174
4	NMSS	58.7%	837
5	Gold	56.9%	40
6	GLLG	54.5%	511
7	YD	53.8%	986
8	DecS	49.8%	2
9	DaiG	46.3%	645
10	ZHAr	44.0%	652
11	ZHG	40.7%	680
12	DaiAr	38.7%	521
13	CL	34.7%	1333
14	WolfF	34.5%	24
15	GLLW	33.6%	317
16	DaiW	32.2%	582
17	ZHW	31.4%	664
18	SS	30.4%	60
19	Wolf	29.2%	20
20	DMR	26.2%	683
21	Puro	13.6%	1

Tabela 5.7: Desempenho por critério.

Assim sendo, apresentamos os resultados dos testes computacionais de acordo com essa metodologia. Os critérios mais eficientes são os critérios de **Arm**, **ZZL**, **GLLAr**, **NMSS**, **Gold**, **GLLG** e **YD** nessa ordem. Estes proporcionaram eficiência superior ao critério **DecS**. Assim o critério de Armijo foi o que obteve melhor desempenho em 61.5% dos problemas. Além disso, chamamos a atenção que o critério **Puro** foi o que obteve o pior desempenho, com 13.6%, enquanto na Tabela 5.3 foi o sexto colocado com 11.3%. Isto demonstra que o critério puro, quando converge, o faz com boa velocidade, mas que, em geral, ele tende a divergir. Notamos ainda que nessa comparação não houve empates e que o critério de **Arm** é mais eficiente que o **ZZL**.

Capítulo 6

CONCLUSÃO

O uso de buscas unidirecionais em métodos de Otimização Irrestrita é fundamental para a obtenção de garantias de convergência global. Neste trabalho, analisamos vários critérios de buscas unidirecionais monótonas e não monótonas encontradas na literatura, e as hipóteses que as direções de buscas precisam satisfazer para que estas buscas unidirecionais forneçam resultados teóricos de convergência. Além disso, estudamos resultados que garantem que as buscas estejam bem definidas e os respectivos processos de obtenção de comprimento do passo foram discutidos. Em alguns casos analisamos a velocidade de convergência.

De acordo com os resultados numéricos obtidos, concluímos quais são os melhores parâmetros para cada busca unidirecional aplicados ao método BFGS para solução de problemas propostos por Moré, Garbow e Hilstrom [25]. A metodologia utilizada para comparar tantos algoritmos foi baseada em [6]. A respeito da comparação entre os critérios de busca unidirecionais, concluímos que a grande maioria dos critérios se mostrou robusto. Aconteceram muitos empates em termos de robustez, mas ao analisar os gráficos de perfis de desempenho concluímos que o critério de Grippo, Lampariello e Lucidi com busca de Armijo [21] e os critérios baseados na busca de Goldstein merecem destaque, pois foram os primeiros a atingir a robustez máxima encontrada. Os critérios de Goldstein [19], de Grippo, Lampariello e Lucidi com busca de Goldstein [21] e o de Dai com busca de Goldstein [11] foram, nessa ordem, os mais robustos. Seguidos pelos critérios monótonos de Armijo [2], de Zhang, Zhou e Li [33], de Wolfe [35, 36]. Os critérios de Wolfe Forte [35, 36], Dai com busca de Wolfe [11], o não monótono de Shi e Shen [33], de Zhang e Hager [38] com buscas de Wolfe, de Armijo e de Goldstein e de Yin e Du [37] foram um pouco menos robustos que os critérios citados. Os demais critérios se mostraram inferiores. No que diz respeito à eficiência, os critérios de buscas monótonas de Armijo e de Zhang, Zhou e Li foram os mais eficientes, seguidos pelo critério de busca não monótona de Shi e Shen e de Yin e Du. O critério de Grippo, Lampariello e Lucidi com busca de Armijo também foi eficiente e os demais critérios tiveram desempenho inferiores.

Mediante a uma nova proposta de comparação, classificamos o desempenho de cada critério sem empates. A técnica leva em consideração todas as medidas de trabalho, e não apenas aquelas referentes aos problemas para os quais cada algoritmo foi o mais eficiente. Nessa com-

paração, Arm, ZZL, GLLAr, NMSS, Gold, GLLG e YD aparecem, nessa ordem, como mais eficientes, os demais critérios foram inferiores ao decréscimo simples.

Destacamos os critérios de Armijo, de Goldstein, de Grippo, Lampariello e Lucidi com busca de Armijo como as melhores buscas unidirecionais a serem utilizadas em experimentos práticos, por se mostrarem eficientes e robustos em ambos os testes. O critério de Zhang, Zhou e Li também obteve bom desempenho utilizando parâmetros que praticamente inutilizam o termo quadrático, tornando basicamente o critério de Armijo, e por esta razão não o destacamos. Em particular, damos destaque para as combinações de parâmetros $\sigma = 0,5$ e $\gamma = 0,38$ do critério de Armijo que se mostrou ao mesmo tempo a combinação mais eficientes e mais robustas do seu critério que foi destacado.

Como intenções futuras, pretendemos realizar experimentos com um banco maior de funções, por exemplo com as coleções CUTer ou CUTest, testar as buscas unidirecionais com outros métodos de Otimização Irrestrita, por exemplo o método de Cauchy ou o método de Newton, visto que aparentemente pelos resultados de [21] os critérios de busca não monótonas tendem a ter desempenho superior para este último. Tendo em vista o bom desempenho em eficiência do critério de Yin e Du e do fato de que artigo [37] não apresenta experimentos numéricos, pretendemos testar outras combinações de funções forçantes. Além disso, pretendemos comparar os critérios sem derivadas aplicados a métodos específicos de Otimização sem derivadas.

Apêndice A

RESULTADOS NUMÉRICOS

Apresentamos aqui, as tabelas referentes às melhores combinações de parâmetros utilizados e os melhores resultados numéricos de cada busca unidirecional dos testes computacionais.

Tabela A.1: Parâmetros utilizados em cada busca.

Busca	Estratégia	PARÂMETROS
Puro	1	
DecS	2	$\sigma = 0, 5;$
DecS	3	$\sigma = 0, 618$
DecS	4	$\sigma = 0, 87;$
Arm	8	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38;$
Arm	12	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38;$
Arm	16	$\sigma = 0, 87; \gamma = 0, 38;$
Wolf	20	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9;$
WolfF	24	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9;$
Gold	28	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 9999;$
Gold	32	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 999;$
Gold	36	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 9;$
Gold	39	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 10^{-1}; \rho = 0, 62;$
Gold	40	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 62;$
SS	53	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-1}; \mu = 1; L_k = \frac{\ q_{k-1}\ }{\ p_{k-1}\ ^2};$
SS	59	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; \mu = 1; L_k = \frac{\ q_{k-1}\ }{\ p_{k-1}\ ^2};$
SS	60	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; \mu = 1; L_k = \frac{p_{k-1}^T q_{k-1}}{\ p_{k-1}\ ^2};$
SS	61	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; \mu = 1; L_k = \frac{\ q_{k-1}\ ^2}{p_{k-1}^T q_{k-1}};$
SS	63	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; \mu = 1, 5; L_k = \frac{p_{k-1}^T q_{k-1}}{\ p_{k-1}\ ^2};$
ZZL	119	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; \nu = 10^{-8};$
ZZL	120	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; \nu = 10^{-4};$
ZZL	127	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; \nu = 10^{-8};$
ZZL	128	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; \nu = 10^{-4};$
ZZL	135	$\sigma = 0, 87; \gamma = 0, 38; \nu = 10^{-8};$
ZZL	136	$\sigma = 0, 87; \gamma = 0, 38; \nu = 10^{-4};$
GLLA	161	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-1}; M = 1; N = 1$
GLLA	162	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-1}; M = 1; N = 2;$
GLLA	173	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 1; N = 1;$
GLLA	174	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 1; N = 2;$
GLLA	175	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 1; N = 5;$
GLLA	178	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 3; N = 5;$
GLLA	181	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 5; N = 5;$
GLLA	221	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 1; N = 1;$
GLLA	222	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 1; N = 2;$

GLLAr	223	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 1; N = 5;$
GLLAr	226	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 3; N = 5;$
GLLAr	229	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 5; N = 5;$
GLLAr	270	$\sigma = 0, 87; \gamma = 0, 38; M = 1; N = 2;$
GLLAr	271	$\sigma = 0, 87; \gamma = 0, 38; M = 1; N = 5;$
GLLAr	274	$\sigma = 0, 87; \gamma = 0, 38; M = 3; N = 5;$
GLLAr	277	$\sigma = 0, 87; \gamma = 0, 38; M = 5; N = 5$
GLLW	317	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 1; N = 1;$
GLLW	318	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 1; N = 2;$
GLLW	319	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 1; N = 5;$
GLLW	321	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 3; N = 2;$
GLLW	322	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 3; N = 5;$
GLLW	325	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 5; N = 5;$
GLLW	328	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 10; N = 5;$
GLLG	366	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 9999; M = 1; N = 2;$
GLLG	414	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 999; M = 1; N = 2;$
GLLG	497	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 10^{-1}; \rho = 0, 62; M = 1; N = 1;$
GLLG	498	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 10^{-1}; \rho = 0, 62; M = 1; N = 2;$
GLLG	499	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 10^{-1}; \rho = 0, 62; M = 1; N = 5;$
GLLG	505	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 10^{-1}; \rho = 0, 62; M = 5; N = 5;$
GLLG	511	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 62; M = 1; N = 5;$
GLLG	514	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 62; M = 3; N = 5;$
GLLG	520	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 62; M = 10; N = 5;$
DaiAr	521	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-4}; M = 1;$
DaiAr	522	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-4}; M = 3;$
DaiAr	523	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-4}; M = 5;$
DaiAr	524	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-4}; M = 10;$
DaiAr	526	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-3}; M = 3;$
DaiAr	527	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-3}; M = 5;$
DaiAr	528	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-3}; M = 10;$
DaiAr	530	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-1}; M = 3;$
DaiAr	531	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-1}; M = 5;$
DaiAr	532	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-1}; M = 10;$
DaiAr	534	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 3;$
DaiAr	535	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 5;$
DaiAr	536	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 10;$
DaiAr	549	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 1;$
DaiAr	550	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 3;$
DaiAr	551	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 5;$
DaiW	581	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 1;$
DaiW	582	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 3;$
DaiW	583	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 5;$
DaiW	584	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; M = 10;$
DaiG	597	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 9999; M = 1;$
DaiG	613	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 999; M = 1;$
DaiG	645	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 62; M = 1;$
DaiG	647	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 62; M = 5;$
ZHAr	649	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-4}; \eta = \{0, 85\};$
ZHAr	650	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-3}; \eta = \{0, 85\};$
ZHAr	651	$\sigma = 0, 5; \gamma = 10^{-1}; \eta = \{0, 85\};$
ZHAr	652	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; \eta = \{0, 85\};$
ZHAr	656	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; \eta = \{0, 85\};$
ZHW	664	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \beta = 0, 9; \eta = \{0, 85\};$
ZHG	668	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 9999; \eta = \{0, 85\};$
ZHG	672	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 999; \eta = \{0, 85\};$
ZHG	680	$\sigma_d = 0, 5; \sigma_a = 2; \gamma = 0, 38; \rho = 0, 62; \eta = \{0, 85\};$
DMR	683	$\sigma = 0, 5; M = 1; \{\zeta_k\} = 1.1^{-k}; \{\beta_k\} = \min\{10, \ g_k\ ^2\};$
DMR	694	$\sigma = 0, 5; M = 3; \{\zeta_k\} = \{1.1^{-k}\}; \{\beta_k\} = \{\min\{10, \ g_k\ \}\};$
DMR	695	$\sigma = 0, 5; M = 3; \{\zeta_k\} = \{1.1^{-k}\}; \{\beta_k\} = \{\min\{10, \ g_k\ ^2\}\};$

DMR	706	$\sigma = 0, 5; M = 5; \{\zeta_k\} = \{1.1^{-k}\}; \{\beta_k\} = \{\min\{10, \ g_k\ \}\};$
DMR	707	$\sigma = 0, 5; M = 5; \{\zeta_k\} = \{1.1^{-k}\}; \{\beta_k\} = \{\min\{10, \ g_k\ ^2\}\};$
DMR	718	$\sigma = 0, 5; M = 10; \{\zeta_k\} = \{1.1^{-k}\}; \{\beta_k\} = \{\min\{10, \ g_k\ \}\};$
NMSS	837	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 1; \xi = 1;$
YD	986	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 1; \sigma_1(x) = x; \sigma_2(x) = x^2;$
YD	1012	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 10; \sigma_1(x) = x; \sigma_2(x) = x;$
YD	1013	$\sigma = 0, 5; \gamma = 0, 38; M = 10; \sigma_1(x) = x; \sigma_2(x) = x^2;$
YD	1157	$\sigma = 0, 618; \gamma = 0, 38; M = 10; \sigma_1(x) = x; \sigma_2(x) = x^2;$
CL	1313	$\sigma = 0, 5; \eta = 0, 85; \{\zeta_k\} = \{1.1^{-k}\}; \vartheta = 10^{-1};$
CL	1317	$\sigma = 0, 5; \eta = 0, 85; \{\zeta_k\} = \{1.1^{-k}\}; \vartheta = 0, 38;$
CL	1318	$\sigma = 0, 5; \eta = 0, 85; \{\zeta_k\} = \left\{\frac{\ g_k\ }{k^2}\right\}; \vartheta = 0, 38;$
CL	1333	$\sigma = 0, 618; \eta = 0, 85; \{\zeta_k\} = \{1.1^{-k}\}; \vartheta = 0, 38;$

Tabela A.2: Resultados obtidos em cada combinação de critério e parâmetros.

Busca	Estratégia	PROBLEMAS RESOLVIDOS	EFICIÊNCIA	DESEMPENHO
Puro	1	14.5 %	11.3 %	13.6 %
DecS	2	77.4 %	9.7 %	49.8 %
DecS	3	77.4 %	1.6 %	44.2 %
DecS	4	77.4 %	0 %	32.0 %
Arm	8	87.1 %	19.4 %	61.5 %
Arm	12	87.1 %	4.8 %	55.9 %
Arm	16	87.1 %	0 %	34.7 %
Wolf	20	87.1 %	0 %	29.2 %
WolfF	24	85.5 %	0 %	34.5 %
Gold	28	87.1 %	6.5 %	51.3 %
Gold	32	87.1 %	6.5 %	51.3 %
Gold	36	87.1 %	4.8 %	51.1 %
Gold	39	75.8 %	8.1 %	43.7 %
Gold	40	85.5 %	6.5 %	56.9 %
SS	53	67.7 %	3.2 %	19.1 %
SS	59	69.4 %	1.6 %	20.3 %
SS	60	54.8 %	1.6 %	30.4 %
SS	61	53.2 %	3.2 %	13.4 %
SS	63	54.8 %	3.2 %	30.1 %
ZZL	119	87.1 %	19.4 %	61.4 %
ZZL	120	87.1 %	16.1 %	57.4 %
ZZL	127	87.1 %	4.8 %	55.9 %
ZZL	128	87.1 %	3.2 %	52.5 %
ZZL	135	87.1 %	0 %	34.7 %
ZZL	136	87.1 %	0 %	33.1 %
GLLAr	161	80.6 %	12.9 %	51.6 %
GLLAr	162	82.3 %	12.9 %	53.7 %
GLLAr	173	87.1 %	11.3 %	58.7 %
GLLAr	174	87.1 %	9.7 %	58.8 %
GLLAr	175	87.1 %	6.5 %	58.1 %
GLLAr	178	87.1 %	8.1 %	56.5 %
GLLAr	181	87.1 %	3.2 %	54.9 %
GLLAr	221	87.1 %	3.2 %	54.1 %
GLLAr	222	87.1 %	3.2 %	53.6 %
GLLAr	223	87.1 %	1.6 %	52.6 %
GLLAr	226	87.1 %	1.6 %	50.7 %
GLLAr	229	87.1 %	1.6 %	48.9 %
GLLAr	270	87.1 %	0 %	34.2 %
GLLAr	271	87.1 %	0 %	33.7 %
GLLAr	274	87.1 %	0 %	33.3 %
GLLAr	277	87.1 %	0 %	32.0 %

GLLW	317	85.5 %	0 %	33.6 %
GLLW	318	85.5 %	0 %	33.6 %
GLLW	319	85.5 %	0 %	33.4 %
GLLW	321	85.5 %	0 %	32.3 %
GLLW	322	85.5 %	0 %	32.6 %
GLLW	325	85.5 %	0 %	32.4 %
GLLW	328	85.5 %	0 %	32.4 %
GLLG	366	87.1 %	3.2 %	49.1 %
GLLG	414	87.1 %	3.2 %	49.1 %
GLLG	497	74.2 %	6.5 %	42.2 %
GLLG	498	74.2 %	6.5 %	42.2 %
GLLG	499	74.2 %	6.5 %	42.0 %
GLLG	505	69.4 %	6.5 %	39.2 %
GLLG	511	85.5 %	3.2 %	54.5 %
GLLG	514	85.5 %	6.5 %	52.7 %
GLLG	517	83.9 %	6.5 %	50.9 %
GLLG	520	80.6 %	6.5 %	48.2 %
DaiAr	521	74.2 %	0 %	38.7 %
DaiAr	522	35.5 %	1.6 %	16.4 %
DaiAr	523	33.9 %	1.6 %	16.0 %
DaiAr	524	33.9 %	1.6 %	16.0 %
DaiAr	526	33.9 %	1.6 %	16.0 %
DaiAr	527	33.9 %	1.6 %	16.0 %
DaiAr	528	35.5 %	1.6 %	16.9 %
DaiAr	530	33.9 %	1.6 %	18.6 %
DaiAr	531	32.3 %	1.6 %	18.2 %
DaiAr	532	40.3 %	1.6 %	23.2 %
DaiAr	534	45.2 %	1.6 %	27.4 %
DaiAr	535	40.3 %	1.6 %	26.4 %
DaiAr	536	46.8 %	1.6 %	28.6 %
DaiAr	549	43.5 %	1.6 %	26.3 %
DaiAr	550	43.5 %	1.6 %	25.4 %
DaiAr	551	38.7 %	1.6 %	24.2 %
DaiW	581	85.5 %	0 %	27.6 %
DaiW	582	85.5 %	0 %	32.2 %
DaiW	583	85.5 %	0 %	32.2 %
DaiW	584	85.5 %	0 %	32.2 %
DaiG	597	87.1 %	1.6 %	41.7 %
DaiG	613	87.1 %	1.6 %	41.9 %
DaiG	645	85.5 %	1.6 %	46.3 %
DaiG	647	79.0 %	3.2 %	43.9 %
ZHAr	649	77.4 %	6.5 %	39.7 %
ZHAr	650	77.4 %	6.5 %	39.7 %
ZHAr	651	79.0 %	6.5 %	40.4 %
ZHAr	652	82.3 %	4.8 %	44.0 %
ZHAr	656	82.3 %	3.2 %	41.0 %
ZHW	664	83.9 %	0 %	31.4 %
ZHG	668	82.3 %	1.6 %	36.9 %
ZHG	672	82.3 %	1.6 %	37.1 %
ZHG	680	79.0 %	4.8 %	40.7 %
DMR	683	61.3 %	3.2 %	26.2 %
DMR	694	32.3 %	4.8 %	18.9 %
DMR	695	30.6 %	4.8 %	18.7 %
DMR	706	30.6 %	4.8 %	18.0 %
DMR	707	32.3 %	4.8 %	20.3 %
DMR	718	30.6 %	4.8 %	17.7 %
NMSS	837	85.5 %	17.7 %	58.7 %
YD	986	74.2 %	16.1 %	53.8 %
YD	1012	80.6 %	4.8 %	41.1 %

YD	1013	80.6 %	4.8 %	41.2 %
YD	1157	80.6 %	0 %	36.7 %
CL	1313	64.5 %	6.5 %	33.6 %
CL	1317	64.5 %	6.5 %	33.7 %
CL	1318	64.5 %	6.5 %	34.0 %
CL	1333	67.7 %	0 %	34.7 %

REFERÊNCIAS

- [1] M. Al-Baali e R. Fletcher. *An efficient line search for nonlinear least squares*. Journal of Optimization Theory and Application. Vol. 48. pp. 359-377, 1984.
- [2] L. Armijo. *Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives*. Pacific J. Math. Vol. 16, pp. 1-3, 1966.
- [3] J. Barzilai e J. M. Borwein. *Two-point step size gradient methods*. IMA Journal of Numerical Analysis. Vol. 8. pp. 141-148, 1988.
- [4] H. Bauschke e P. L. Combettes. *Convex Analysis and Monotone Operator Theory in Hilbert Spaces*. Springer. New York, 2011.
- [5] D. Bertsekas. *Convex Analysis and Optimization*. Athena Scientific. Belmont, Vol. 1, 2003.
- [6] E. G. Birgin, R. A. Castillo e J. M. Martínez. *Numerical comparison of Augmented Lagrangian algorithms for nonconvex problems*. Computational Optimization and Applications. Vol. 1, pp. 31-55, 2003.
- [7] J. F. Bonnans, J. C. Gilbert, C. Lemaréchal e C. A. Sagastizábal. *Numerical Optimization: Theoretical and Practical Aspects*. Springer. Berlin, 1997.
- [8] C. G. Broyden. *The convergence of a class double-rank minimization algorithms*. Journal of the Institute of Mathematics and its Applications. Vol. 6, pp. 76-90, 1970.
- [9] W. Cheng e D. H. Li. *A derivative-free nonmonotone line search and its application to the spectral residual method*. IMA Journal of Numerical Analysis. Vol. 29, pp. 814-825, 2008.
- [10] B. Christianson. *Global convergence using de-linked Goldstein ou Wolfe line search conditions*. Advanced Modeling and Optimization. Vol. 11, 2009.
- [11] Y. H. Dai. *On the nonmonotone line search*. Journal of Optimization Theory and Applications. Vol. 112, pp. 315-300, 2002.
- [12] W. C. Davidon. *Variable metric methods for minimization* Argonne National Labs Report. ANL-5990, 1959.

- [13] M. A. Diniz-Ehrhardt, J. M. Martínez e M. Raydan. *A derivative-free nonmonotone line-search technique for unconstrained optimization*. Journal of Computational and Applied Mathematics. Vol. 219, pp. 383-397, 2008.
- [14] E. D. Dolan, J. J. Moré. *Benchmarking optimization software with performance profiles*. Mathematical Programming. Vol. 91, pp. 201-213, 2002.
- [15] R. Fletcher. *A new approach to variable metric algorithms*. Computer Journal. Vol. 13, pp. 317-322, 1970.
- [16] R. Fletcher e M. J. D. Powell. *A rapid convergent descent method for minimization*. Computer Journal. Vol. 6, pp. 163-168, 1963.
- [17] R. Fletcher e C. M. Reeves. *Function minimization by conjugate gradients*. Computer Journal. Vol. 7, pp. 149-154, 1964.
- [18] D. Goldfarb. *A family of variable metric methods derived by variation mean*. Mathematics of Computation. Vol. 23, pp. 23-26, 1970.
- [19] A. A. Goldstein. *On steepest descent*. SIAM J. Control. Vol. 3, pp. 147-151, 1965.
- [20] C. C. Gonzaga, E. W. Karas e D. R. Rossetto. *An optimal algorithm for constrained differentiable convex optimization*. SIAM Journal on Optimization. Vol. 23, pp. 1939-1955, 2013.
- [21] L. Grippo, F. Lampariello e S. Lucidi. *A nonmonotone line search technique for Newton's method*. SIAM Journal on Numerical Analysis. Vol. 23, pp. 707-716, 1986.
- [22] D. H. Li e M. Fukushima. *A derivative-free line search and global convergence of Broyden-like method for nonlinear equations*. Optimization Methods and Software. Vol. 13, pp. 181-201, 2000.
- [23] E. L. Lima. *Curso de Análise* IMPA. Rio de Janeiro, Vol.2, 11 ed. 2012.
- [24] J. M. Martínez e S. A. Santos. *Métodos computacionais de otimização*. 20º Colóquio Brasileiro de Matemática - IMPA. Rio de Janeiro, 1995.
- [25] J. J. Moré, B. S. Garbow e K. E. Hillstom. *Testing unconstrained optimization software*. ACM Transactions on Mathematical Software. Vol. 7, pp. 17-41, 1981.
- [26] J. J. Moré e D. J. Thuente. *Line search algorithms with guaranteed sufficient decrease*. ACM Transactions on Mathematical Software. Vol. 20, pp. 286-307, 1994.
- [27] A. M. Mota. *Convergência de algoritmos para programação não linear*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Paraná. Curitiba, 2005.
- [28] Y. Nesterov. *Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course*. Kluwer Academic Publishers. Norwell, 2004.

- [29] J. Nocedal e S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag. New York, 2006.
- [30] A. A. Ribeiro e E. W. Karas. *Otimização contínua: Aspectos teóricos e computacionais*. Cengage Learning. São Paulo, 2013.
- [31] H. H. Rosenbrock, *An automatic method for finding the greatest or least value of a function*. Comput. J. Vol. 3, pp.175-184, 1960.
- [32] D. F. Shanno. *Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization*. Math. Comput. Vol. 24, pp.647-656, 1970.
- [33] Z. J. Shi e J. Shen. *Convergence of nonmonotone line search method*. Journal of Computational and Applied Mathematics. Vol. 193, pp. 397-412, 2006.
- [34] Z. J. Shi e J. Shen. *New inexact line search method for unconstrained optimization*. Journal of Optimization Theory and Applications. Vol. 127, pp. 425-446, 2005.
- [35] P. Wolfe. *Convergence conditions for ascent methods*. SIAM Review Vol. 11, pp. 226–235, 1966.
- [36] P. Wolfe. *Convergence conditions for ascent methods. II: Some Corrections*. SIAM Review. Vol. 13, pp. 185–188, 1971.
- [37] H. X. Yin e D. L. Du. *The global convergence of self-scaling BFGS algorithm with nonmonotone line search for unconstrained nonconvex optimization problems*. Acta Mathematica Sinica, English Series. Vol. 23, pp. 1233-1240, 2007.
- [38] H. Zhang e W. W. Hager. *A nonmonotone line search technique and its application to unconstrained optimization*. SIAM Journal on Optimization. Vol. 14, pp. 1043-1056, 2004.
- [39] L. Zhang, W. Zhou e D. Li. *Global convergence of a modified Fletcher-Reeves conjugate gradient method with Armijo-type line search*. Numerische Mathematik. Vol. 104, pp. 561-572, 2006.